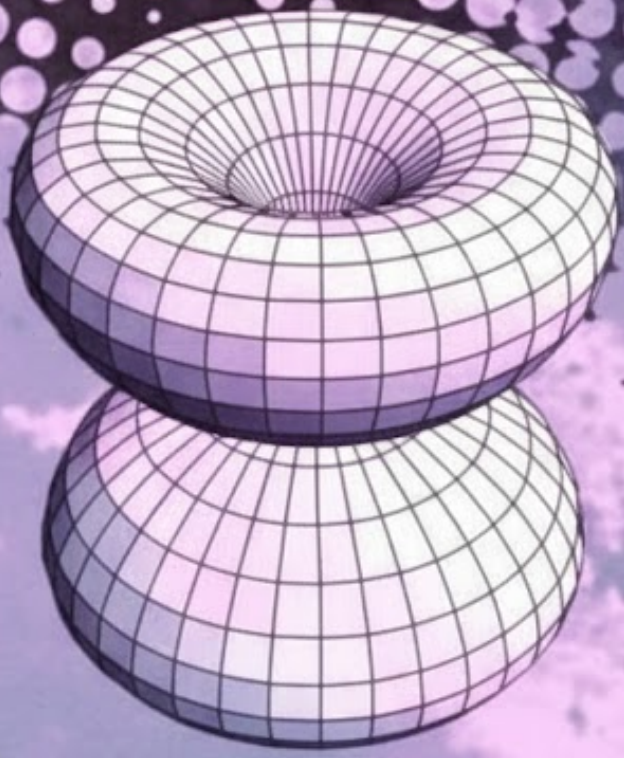
Bekir KARAOĞLU



KUANTUM MEKANİĞİNE GİRİŞ

Genişletilmiş
6. Baskı

seçkin

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ 7

1 KISA BİR TARİHSEL GELİŞME **9**

1.1 KARACİSİM IŞIMASI 10

1.2 FOTOELEKTRİK OLAY 13

1.3 COMPTON OLAYI 15

1.4 RUTHERFORD ATOM MODELİ ve BOHR TEORİSİ 17

1.5 de BROGLIE HİPOTEZİ ve MADDE DALGALARI 20

PROBLEMLER 22

2 MADDE ve DALGA **23**

2.1 DALGA-PARÇACIK İKİLEMİ 23

2.2 DALGA PAKETİ 26

2.3 FOURIER SERİSİ ve İNTEGRALİ 29

2.4 BELİRSİZLİK İLKESİ 34

PROBLEMLER 36

3 SCHRÖDİNGER DENKLEMİ **39**

3.1 OPERATÖR KAVRAMI 40

3.2 SCHRÖDİNGER DALGA DENKLEMİ 42

3.3 DALGA FONKSİYONUNUN OLASILIK YORUMU 44

3.4 BEKLENEN DEĞERLER 49

3.5 MOMENTUM UZAYI 52

3.6 ZAMANDAN BAĞIMSIZ SCHRÖDİNGER DENKLEMİ 55

3.7 SERBEST PARÇACIK-DÜZLEM DALGA ÇÖZÜMÜ 57

3.8 DİRAC DELTA FONKSİYONU 59

PROBLEMLER 61

4 TEK BOYUTLU SİSTEMLER **63**
4.1 BASAMAK POTANSİYELİ 63
4.2 POTANSİYEL ENGELİ. TÜNEL OLAYI 67
4.3 SONSUZ KUYU POTANSİYELİ 72
4.4 KARE KUYU POTANSİYELİ 74
4.5 HARMONİK SALINICI 79
4.6 PERİYODİK POTANSİYEL – BANT TEORİSİ 89
PROBLEMLER 95

5 KUANTUM MEKANİĞİNİN GENEL FORMALİZMİ **97**
5.1 DALGA FONKSİYONU UZAYI 97
5.2 LİNEER OPERATÖRLERİN MATRİS TEMSİLİ 101
5.3 SÜPERPOZİSYON İLKESİ 108
5.4 SIRA DEĞİŞTİREN OPERATÖRLER ve ÖLÇME 111
5.5 DİRAC BRA-KET NOTASYONU 117
5.6 BAZI ÖZEL OPERATÖRLER 120
PROBLEMLER 122

6 3 BOYUTLU PROBLEMLER **125**
6.1 KÜRESEL SİMETRİK POTANSİYEL 125
6.2 AÇISAL MOMENTUM ÖZFONKSİYONLARI 128
6.3 RADYAL SCHRÖDİNGER DENKLEMİ 136
6.4 HİDROJEN ATOMU 143
PROBLEMLER 156

7 YAKLAŞIK YÖNTEMLER ve PERTÜRBASYON TEORİSİ **159**
7.1 PERTÜRBASYON AÇILIMI 159
7.2 VARYASYON YÖNTEMİ 173
7.3 ZAMANA BAĞIMLI PERTÜRBASYON TEORİSİ 175
7.4 İKİ ÖZEL YAKLAŞIK YÖNTEM 182
PROBLEMLER 185

8 AÇISAL MOMENTUM VE SPİN **189**
8.1 AÇISAL MOMENTUM CEBİRİ 189
8.2 SPİN 195
8.3 İKİ AÇISAL MOMENTUMUN TOPLAMI 202

8.4 SPİNE BAĞIMLI ETKİLEŞMELER 209
PROBLEMLER 216

9 SİMETRİ ve DÖNÜŞÜMLER **219**
9.1 ÖTELEME. BİRİMSEL DÖNÜŞÜMLER 220
9.2 DÖNME 224
9.3 YANSIMA 231
9.4 SİMETRİ ve KORUNUM YASALARI 232
PROBLEMLER 234

10 ÖZDEŞ PARÇACIKLAR **237**
10.1 SİMETRİLEŞTİRME İLKESİ 238
10.2 HELYUM ATOMU PROBLEMİ 243
10.3 HİDROJEN MOLEKÜLÜ PROBLEMİ 247
10.4 *N*-PARÇACIK SİSTEMLERİ 249
10.5 DURUM YOĞUNLUĞU 252
PROBLEMLER 255

11 SAÇILMA **257**
11.1 TEMEL KAVRAMLAR 258
11.2 GREEN FONKSİYONU 262
11.3 YAKLAŞIK BORN YÖNTEMİ 265
11.4 UYGULAMALAR 267
PROBLEMLER 270

EKLER **271**
EK A. REFERANSLAR 271
EK B. TEMEL FİZİK SABİTLERİ 272
EK C. PROBLEM SONUÇLARI 273

DİZİN **277**

ÖNSÖZ

Bu kitap Fen-Edebiyat ve Eğitim Fakültelerinin Fizik Bölümlerinde okutulan Kuantum Mekaniğine Giriş derslerine yardımcı olmak amacıyla, bir ders kitabı olarak hazırlanmıştır. Modern Fizik derslerinin hemen ardından öğrenilen Kuantum Mekaniği yöntemleri ile öğrenci, daha sonra Katı Hal Fiziği, Çekirdek Fiziği, ... vs. derslerini izlemeye hazır duruma gelmiş olur. Daha önce, İstanbul Teknik ve Boğaziçi Üniversitelerinde lisans ve lisansüstü düzeyinde vermiş olduğum ders notlarını, öğrencilerin karşılaştığı güçlükleri gözönüne alıp, yeniden gözden geçirdim ve kitap haline getirdim.

İki yarıyıl kapsayacağı düşünülen konular 11 bölümde toplanmıştır. İlk 5 bölümde teorinin temelleri atılmış, tek boyutlu uygulamalarla pratik kazanıldıktan sonra genel formalizm verilmiştir. Daha dikkat isteyen ve matematiksel yönü ağır basan konular son 6 bölümde toplanmıştır. Her bölüm içinde, konunun anlaşılmasına yardımcı olmayı amaçlayan çözümlü alıştırmalar verilmiştir. Bölüm sonlarında ise, konuyu anlamış olan öğrencinin çözebileceği türden problemler yer almaktadır. Bir bölümün problemleri çözülmeden, bir sonraki bölüme geçilmesi doğru olmaz.

Kitabın, artık bir Kuantum Mekaniği kitabında bulunması standard kabul edilen konuları öğrencinin kolay anlayacağı bir dille ve bol örnekli olarak vermeye çalışması açısından, yararlı olacağına inanıyorum. Birçok elemanter ispatı veya ayrıntıyı açıkça gösterdim; böylece, öğrencinin kendi başına çalışıp öğrenebileceği, öğretim üyesinin ayrıntılar için referans verebileceği bir ders kitabı olmasını istedim.

Kitabın bu yeni basımında yeni bir kısım eklenmiş ve dizgi yanlışları düzeltilmiştir. Bugüne kadarki basımlarda birçok öğretim üyesi ve eğitimci gerek eleştiri ve düzeltmelerini bildirerek, gerekse kullanım deneyimlerini bana aktararak yardımcı oldular. Kendilerine minnettar olduğum meslekdaşlarımı burada anmak isterim: Yeditepe Üniversitesi'nden sayın Profesör R. Ömür Akyüz, Yeditepe Üniversitesi'nden sayın Profesör Avadis M. Hacınlıyan, Wuerzburg Üniversitesi'nden sayın Profesör Enver Nakhmedov, Kocaeli Üniversitesi'nden sayın Yrd.Doç.Dr. Abdurrahman Andiç, Pamukkale Üniversitesi'nden sayın Yrd.Doç.Dr. Muzaffer Adak, sayın eğitimci Mehmet Özyazgan ve sayın Mehmet Karaoğlu. Ayrıca, tüm üniversitelerimizdeki öğretim üyeleri ve öğrencilerimizin bugüne kadar gösterdiği ilgi ve desteğe teşekkür ederim.

Kitabı Zehra, Pınar ve Mehmet'e ithaf ediyorum.

5 Ocak 2008

Bekir KARAOĞLU

BÖLÜM 1

KISA BİR TARİHSEL GELİŞME

Ondokuzuncu yüzyılın sonlarına doğru, bilinen Klasik Fizik teorilerinin tüm fiziksel olayları açıklamakta yeterli olduğuna inanılıyordu. Mekanik olaylarını Newton Yasaları, elektrik ve optik olaylarını da Maxwell Denklemleri açıklayabiliyordu. Yeni başlamakta olan İstatistik Mekanik teorisi de termodinamik olaylarını açıklamakta başarılı oluyordu.

Derken, aynı yıllarda yapılan bir dizi deneysel çalışmalar, bu klasik çerçeve ile uyumsuzluk göstermeye başladılar. Mevcut teoriler bu deneysel gözlemleri açıklamakta yetersiz kalıyorlardı (bu deneylerin neler olduğu aşağıda kısaca incelenecektir). Sonunda, klasik çerçeve çatırdadı ve Fiziğe yeni fikirler ve kavramlar katma zorunluluğu doğdu.

30 yıl kadar süren bir arayışın sonunda Kuantum Mekaniği denilen yeni bir bilim felsefesi doğdu. Kısaca tanımlamak gerekirse, *Kuantum Mekaniği mikroskopik sistemleri (atom, çekirdek, vs.) matematiksel nesneler (dalga fonksiyonları) cinsinden tanımlayan ve matematiksel nesneleri fiziksel içeriğe dönüştürmek üzere bir dizi kurallar veren bilimsel bir yöntemdir.*

Kuantum Mekaniğinin gelişmesinde önem taşıyan bazı kilometre taşları şunlardır:

Karacisim Işıması	(1900, Max Planck)
Fotoelektrik olay	(1905, Albert Einstein)
Alfa saçılması ve atom modeli	(1911, Ernest Rutherford)
Atom spektrumunun kuantal açıklaması	(1913, Niels Bohr)
Madde dalgası kavramı	(1925, Louis de Broglie)
Dalga Denklemi	(1926, Erwin Schrödinger)
Belirsizlik İlkesi	(1927, Werner Heisenberg)

Her ne kadar Kuantum Mekaniği aksiyomatik bir yaklaşımla öğretilebilirse de, tarihsel gelişmeyle motive edilen bir yaklaşımın daha pedagojik olduğu kabul edilmiştir. Bu kitapta da tarihsel gelişmeye dayalı bir yol izlenecektir.

Şimdi, Klasik Fiziğin yetersiz kaldığı bu olaylardan bazılarını inceleyelim.

1.1 KARACİSİM IŞIMASI

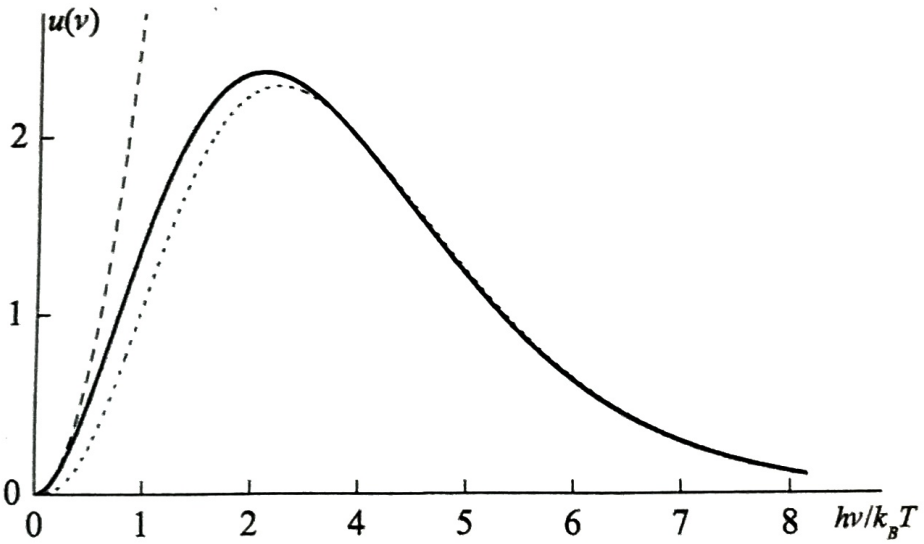
Tanım olarak *karacisim*, üzerine düşen her ısı radyasyonunu soğuran bir cisimdir. Hiçbir ışını yansıtmadığı veya geçirmediği için de kara bir görüntüsü olur. Bu tanıma uyan gerçek bir cisim yoktur ama, pratik olarak şöyle bir model alınır: Metalden yapılmış içi boş bir kutu alıp bunun bir yüzünde küçük bir delik açtığımızı düşünelim. Bu delikten giren bir ışın iç duvarlarda sürekli yansır durur ama tekrar delikten dışarı çıkma olasılığı pek azdır. Böylece "gelen ışının geri yansımaması" koşulu gerçekleşmiş demektir.

Bu kara cisim içinde hapsolan radyasyonlar, duvar atomlarıyla etkileştiğinde bazıları soğurulur, bazan da duvar atomları radyasyon üretebilir. Sonunda bir termal denge durumuna erişildiğinde karacisim içindeki radyasyonun spektrumu delikten gözlenebilir.

Bu radyasyonun birim alandaki ve frekansı ν ile $\nu + d\nu$ arasındakilerinin ışıma gücü yoğunluğunu dE_ν ile gösterelim (birim: Watt/m^2). Bu büyüklük, seçtiğimiz $d\nu$ aralığıyla orantılı olacaktır. Bu durumda

$$dE_\nu = u(\nu)\, d\nu$$

ile *spektral dağılım fonksiyonu* denilen yeni bir $u(\nu)$ büyüklüğü tanımlayabiliriz (birim: Watt/m^2 Hz). Deneysel olarak gözlenen bir $u(\nu)$ eğrisi Şekil 1.1 de verilmiştir.



Şekil 1.1: Karacisim ışıma spektrumu. Kesik çizgiler Raleigh-Jeans formülünü, noktalı çizgiler ise Wien formülünü göstermektedir.

Karacisim ışımasının iki önemli özelliği olduğu deneysel olarak görülmüştü:

1. Toplam ışıma enerjisi (yani, şekilde eğri altında kalan alan)

$$\int_0^\infty u(\nu)d\nu = \sigma T^4$$

olup, T sıcaklığının 4. kuvvetiyle orantılıdır. Burada $\sigma = 5.67 \times 10^{-8}\mathrm{W/m^2K^4}$ değerindeki sabit *Stefan-Boltzmann sabiti* olarak bilinir.

2. Her eğrinin maksimum değer aldığı dalgaboyu $\lambda_{\max}$ (veya, frekans $\nu_{\max}$) ile denge sıcaklığı T arasında

$$\lambda_{max}\, T = 2.9 \times 10^{-3}\ \mathrm{mK}$$

bağıntısı vardır. Bu eşitliğe *Wien yerdeğiştirme yasası* denir.

Spektral dağılım fonksiyonu $u(\nu)$ için, 1900 yılında Rayleigh ve Jeans, elektrodinamik ve termodinamik argümanlara dayanarak şöyle bir formül elde ettiler:

$$u(\nu) = \frac{8\pi k_B T}{c^3}\,\nu^2 \qquad \text{(Rayleigh-Jeans Yasası, 1900)}$$

Kolayca görüldüğü gibi, yüksek frekanslarda ($\nu \to \infty$) bu ifade ν^2 şeklinde ıraksaklaştığından, deneyle bağdaşmaz (günümüzde dahi karacisim ışıması için klasik fiziğin yapabildiği en iyi şey bu formüldür).

Diğer bir yaklaşımda ise, termodinamik varsayımlara dayanarak şöyle bir genel ifade elde edilmişti :

$$u(\nu) = \nu^3\, F(\nu/T) \qquad \text{(Wien Yasası, 1893)}$$

Eğer, $F(\nu/T) = Ae^{-B\nu/T}$ gibi bir ifade keyfi olarak seçilirse spektrum oldukça doğru olarak elde edilebilir. Ancak, neden bu F fonksiyonunun alınacağı klasik termodinamik yoluyla açıklanamamıştır.

1900 yılında Max Planck kendi bulduğu bir varsayımla karacisim ışıma spektrumunu tam olarak açıklamayı başaran teorik formülünü yayınladı:

$$\boxed{u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3}\,\frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1}} \qquad (1.1)$$

Bu varsayıma göre, *atomların radyasyon alışverileri sürekli bir süreç olmayıp kesikli birimler (kuantumlar) alışverişi ile olmaktadır.* Frekansı ν olan bir radyasyonun atomlara enerji dağıtımı $h\nu$ kadar bir miktarın katları kadar olacaktır:

$$\boxed{E = nh\nu \qquad (n = 1,2,3,\ldots)} \qquad (1.2)$$

Burada h Planck sabiti olup değeri $h = 6.63 \times 10^{-27}$erg s dir. $h\nu$ temel birimine *enerji kuantumu* adı verilir.

Planck enerji kuantalanması varsayımını sadece karacisim ışımasını açıklayabilmek için ortaya attığını söylemişti. Ne yazık ki bu varsayımın yorumunu yapamadan bıraktı; fizikte yeni bir çağ açtığının farkında değildi. Yeni bir anlayışın doğduğunu ancak beş yıl sonra Einstein gösterecekti.

Kısaca özetlersek, Planck'ın katkısı şu bakımlardan önemli olmuştur:

- Modern Fiziğin temel bir kavramı olan enerji kuantalanması fikri ilk kez kullanılmıştır.
- Fiziğin evrensel sabitlerinden biri olan Planck sabiti tanımlanmıştır.

Alıştırma 1.1: *Planck formülündeki $u(\nu)$ ifadesinin*

(a) alçak frekanslarda ($\nu \to 0$) Rayleigh-Jeans formülüne,

(b) yüksek frekanslarda ($\nu \to \infty$) Wien formülüne dönüştüğünü gösterin.

Çözüm: $x = h\nu/kT$ gibi boyutsuz yeni bir değişken tanımlarsak Planck formülü (denklem 1.1)

$$u(\nu) = \frac{8\pi(k_BT)^3}{h^2c^3}\frac{x^3}{e^x - 1}$$

olur. Küçük x değerleri için $e^x - 1 \approx x$ ve büyük x değerleri için $e^x - 1 \approx e^x$ yaklaşık değerleri alınırsa

(a) $u(\nu) \approx \dfrac{8\pi(k_BT)^3}{h^2c^3}x^2 = \dfrac{8\pi k_BT}{c^3}\nu^2$ $\qquad (\nu \to 0)$

(b) $u(\nu) \approx \dfrac{8\pi h}{c^3}\nu^3\, e^{-h\nu/k_BT}$ $\qquad (\nu \to \infty)$

bulunur.

Alıştırma 1.2: *Stefan-Boltzmann yasasının*

$$\int_0^\infty u(\nu)d\nu \sim T^4$$

doğruluğunu gösterin.

Çözüm: Yine boyutsuz $x = h\nu/kT$ değişkeni kullanılırsa eğri altında kalan alan

$$\int_0^\infty u(\nu)d\nu = \frac{8\pi h}{c^3}\int_0^\infty \frac{(k_BTx/h)^3}{e^x - 1}\frac{k_BTdx}{h} = \left(\frac{8\pi k_B^4}{h^3c^3}\right)T^4\int_0^\infty \frac{x^3dx}{e^x - 1}$$

Buradaki boyutsuz integral sonlu bir değere sahiptir. Bunun değerine I dersek

$$\int_0^\infty u(\nu)d\nu = \left(\frac{8\pi k_B^4}{h^3c^3}\right)T^4 \times I = \text{sabit} \times T^4 \qquad \text{olur}$$

Alıştırma 1.3: *Planck formülünü kullanarak Wien yerdeğiştirme yasasını*

$$\lambda_{\max}\, T = 2.9 \times 10^{-3}\ \text{m K}$$

bulun.

Çözüm: Belirli bir $d\lambda$ aralığına karşılık gelen $u(\lambda)$ dağılım fonksiyonu biliniyorsa bunun λ ya göre türevi sıfıra eşitlenerek $\lambda_{\max}$ bulunabilir. Burada dikkat edilmesi gereken nokta şudur: Her ne kadar dalgaboyu ile frekans arasında ($\nu = c/\lambda$) bağıntısı varsa da, metinde verilen $u(\nu)$ ifadesinde bu bağıntıyı kullanarak $u(\lambda)$ elde edilemez. Işıma gücü yoğunluğu olan $dE(\nu)$ fonksiyonuna tekrar dönelim. Bu büyüklüğün $d\nu$ ile orantılı olduğu yazılarak $u(\nu)$ fonksiyonu bulunmuştu. Bu kez λ ile $\lambda + d\lambda$ aralığına karşılık gelen dE yoğunluğunun $d\lambda$ ile orantılı olduğu yazılırsa $u(\lambda)$ tanımlanmış olur.

$$dE = u(\lambda)\, d\lambda$$

Şimdi ν ile λ değişkenleri arasında ($\nu = c/\lambda$) bağıntısı kullanılırsa aynı dE yoğunluğundan bahsediyoruz demektir:

$$dE = u(\nu)\, d\nu = u(\lambda)\, d\lambda$$

Buradan

$$u(\lambda) = u(\nu)\, \frac{d\nu}{d\lambda}$$

ve

$$u(\lambda) = -\frac{c}{\lambda^2}\, u(\nu = c/\lambda)$$

olur (Eksi işareti ν nin arttığı durumda λ nın azaldığını gösterir. λ ekseninin yönü artan yönde seçilirse eksi işareti kalkar). Sonuçta

$$u(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\, \frac{1}{e^{\frac{hc}{k_B T \lambda}} - 1}$$

olur. Bu ifadenin λ ya göre (daha kolayı, boyutsuz $x = hc/k_B T\lambda$ değişkenine göre) türevi sıfıra eşitlenirse (sabitler sonucu etkilemediğinden yazmak gerekmez)

$$\frac{du}{dx} = \text{sabit} \times \left\{5x^4(e^{1/x} - 1) - x^5(-e^{1/x}/x^2)\right\} = 0$$

veya

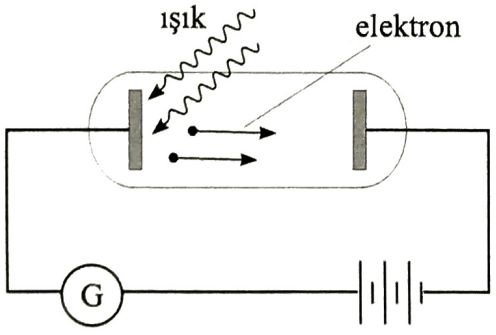
$$(5x - 1)e^{1/x} = 5x$$

bulunur. Bu denklemin analitik çözümü olmadığından sayısal çözüme gidilir. Çözüm $x_{\max} = 0.2014$ dir. Buradan

$$\begin{aligned} k_B T \lambda_{\max} &= 0.2014 \\ \lambda_{\max}\, T &= 0.0029 \ \text{m K} \qquad \text{bulunur.} \end{aligned}$$

1.2 FOTOELEKTRİK OLAY

1890 yılında Hertz tarafından ilk kez gözlenen bu olayda, temiz bir metal yüzeye düşen ışık ışınları metal yüzeyden elektronların koparak serbest hale geçmesine yol açarlar. Bu metal yüzeyle (katod) başka bir metal (anod) arasına bir potansiyel farkı uygulanırsa galvanometrede bir akım ölçülebilir (Şekil 1.2).



Şekil 1.2: Fotoelektrik olayı incelemek üzere hazırlanmış bir deney.

Fotoelektrik olayın, klasik fizikle açıklanması imkansız olan şu özellikleri sayılabilir:

- Yüzeyden elektron kopması ancak, düşen ışığın frekansı bir eşik değerden büyük olduğu zaman başlar.
- Salınan elektronların kinetik enerjisi ışığın şiddetinden bağımsız fakat frekansa lineer olarak bağımlıdır.

Fotoelektrik olay olabilmesi klasik teoriye göre mümkün, ama gözlenen bu davranışları klasik olarak açıklamak mümkün değildir. Örneğin, ışığın taşıdığı enerji (her elektromagnetik dalga gibi) ışık şiddetiyle orantılıdır. Bu durumda, elektronların kazandığı enerjinin de ışığın şiddetine bağımlı olması beklenirdi. Ayrıca, elektron enerjilerinin frekansa bağımlı oluşunu klasik olarak açıklamak mümkün değildir.

Işığın bir dalga olmayıp enerji kuantumu paketlerinden oluştuğu fikri 1905 yılında Einstein tarafından ortaya atıldı. Buna göre, frekansı ν olan bir ışık demeti herbiri $E = h\nu$ kadar enerji kuantumu taşıyan *foton*lardan oluşur. Bu fotonlardan biri metal yüzeyde soğurulduğunda $h\nu$ kadar enerji bırakır. Bu enerjiyi alan bir elektron yüzeyden kopabilmek için W kadar bir enerji (*İş fonksiyonu*) harcayarak serbest hale geçebiliyorsa kalan miktar onun kinetik enerjisi olur:

$$\frac{1}{2}m\nu^2 = h\nu - W \tag{1.3}$$

$h\nu$ değeri W den küçük olduğunda elektronlar kopamıyacağından, eşik frekansının varlığı da böylece açıklanmış olur.

Böylece Einstein ışığın bir dalga olmayıp, parçacıklar (fotonlar) topluluğu olması gerektiğini ortaya attı. Burada bir çelişki ile karşılaşıyoruz: Newton zamanından beri girişim ve kırınım olayları ışığın dalga karakterinde olmasını gerektiriyordu. Parçacık yapısındaki enerji kuantumları cinsinden bu olayları açıklamak mümkün değildir.

Daha sonra görüleceği üzere, bu görünürdeki çelişki *dalga-parçacık ikilemi* olarak bilinir. Burada kısaca açıklarsak, modern yoruma göre her iki karakter de doğrudur: Işık bazı olaylarda dalga, bazı olaylarda da parçacık gibi davranır. Ama bir olay sırasında iki karakteri de aynı anda göstermez.

Einstein'ın fotoelektrik formülü daha sonra Millikan tarafından yapılan çok hassas deneylerle de doğrulandı.

Planck ışık enerjisinin $h\nu$ nin katları halinde alınıp verildiğini söylemişti. Einstein bir adım daha atarak, ışığın $E = h\nu$ kadar enerjiye sahip parçacıklardan oluştuğunu gösterdi.

Alıştırma 1.4 : Dalga boyu 6500 Å olan kırmızı ışığın enerjisi ne kadardır?

Çözüm : $E = h\nu$ ve $\nu = c/\lambda$ olduğundan

$$E = hc/\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{6500 \times 10^{-10}} = 3.06 \times 10^{-19} \text{ J}$$

bulunur.

Alıştırma 1.5: *Bakırın iş fonksiyonu* $W = 6.8 \times 10^{-19}$ J *dur. Bakırdan elektron koparmak için kullanılacak ışığın frekansı en az ne olmalıdır?*

Çözüm: Elektrona verilecek olan $h\nu$ enerjisi en azından iş fonksiyonunu karşılayabilmelidir. Bu durumda elektron sıfır kinetik enerjiyle çıkar.

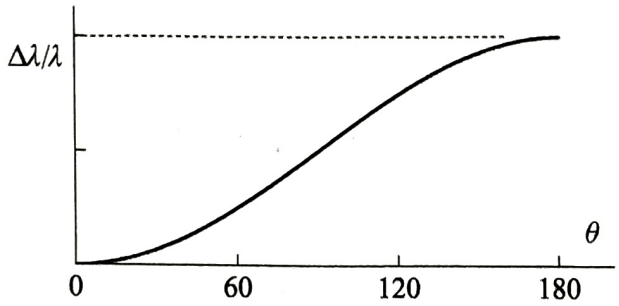
$$\begin{aligned} 0 &= h\nu - W \\ \nu &= W/h \end{aligned}$$

olmalıdır. Buradan $\nu = 1.1 \times 10^{15}$ Hz bulunur.

1.3 COMPTON OLAYI

Işığın (fotonların) parçacık gibi davranabileceği varsayımının kesin delili 1922 de Compton tarafından bulundu.

Compton grafit üzerinde X-ışınlarıyla yaptığı deneyler sırasında saçılan ışınların dalgaboylarını ölçtü ve gönderdiği ışının dalgaboyundan daha büyük değerler buldu. Saçılma açısı büyüdükçe dalgaboyu da büyük oluyordu (Şekil 1.3).



Şekil 1.3: Compton saçılmasında dalgaboyunun saçılma açısıyla değişimi.

Bir radyasyon tek bir atom veya elektron üzerine gönderildiğinde ışınlardan bir bölümü değişik yönlerde saçılmaya uğrar. Klasik teoriye göre, gelen elektromagnetik dalganın etkisiyle titreşmeye başlayan elektrik yükü değişik yönlerde yeni elektromagnetik dalgalar yayınlamaya başlar. Ama tüm bu dalgaların dalgaboyu, başlangıçta gelen ışının dalgaboyuna eşit olmalıdır.

Compton bu sonucu açıklayabilmek için Einstein'ın foton teorisine başvurdu: *Madem ki fotonlar enerji taşıyabiliyorlar, öyleyse momentum da taşıyabilirlerdi.* Böylece, bilinen enerji ve momentum korunum yasaları fotonun elektronla yaptığı çarpışma için de uygulanırsa gözlemler açıklanabilirdi.

Enerjisi E olan bir elektromagnetik dalganın $p = E/c$ kadar bir momentum taşıdığını biliyoruz. Bunu Einstein'ın foton enerjisi $E = h\nu$ ye uygulayan Compton, foton momentumunun

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \tag{1.4}$$

olması gerektiğini savundu. Şimdi bu varsayımla Compton'un gözlemlerinin nasıl açıklanabileceğini görelim.

x yönünde h/λ momentumuyla ilerleyen bir dalganın durgun bir elektrona çarptıktan sonra θ açısı yönünde ve dalgaboyu $\lambda' = \lambda + d\lambda$ olarak devam ettiğini düşünelim (Şekil 1.4).

Şekil 1.4: Compton saçılması olayında foton ve elektronun momentum vektörleri.

Çarpışma sonrası elektronun momentumu $m_e v$ ile foton momentumu h/λ' nın vektör toplamı $+x$ yönünde ve ilk momentum h/λ ya eşit olmalıdır. Şekildeki çizimden de görüldüğü gibi (momentum korunumuna göre) bu üç vektör bir üçgenin kenarlarını oluştururlar. Kosinüs bağıntısını bu üçgene uygularsak

$$(m_e v)^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda + d\lambda}\right)^2 - 2\,\frac{h}{\lambda}\,\frac{h}{\lambda + d\lambda}\cos\theta$$

olur. Burada yaklaşık olarak

$$\frac{1}{\lambda + d\lambda} = \frac{1}{\lambda}\left(1 + \frac{d\lambda}{\lambda}\right)^{-1} \approx \frac{1}{\lambda}\left(1 - \frac{d\lambda}{\lambda}\right)$$

kullanılır ve $(d\lambda/\lambda)^2$ li terimler ihmal edilirse

$$\frac{1}{2} m_e^2 v^2 \approx \frac{h^2}{\lambda^2}\left(1 - \frac{d\lambda}{\lambda}\right)(1 - \cos\theta)$$

yazılabilir. Şimdi enerji korunumunu kullanalım. Başlangıçtaki fotonun enerjisi $h\nu = hc/\lambda$ ile sondaki fotonun enerjisi $hc/(\lambda + d\lambda)$ arasındaki fark elektrona verilmiş olacağından

$$\frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{hc}{\lambda} - \frac{hc}{\lambda + d\lambda} = hc\,\frac{d\lambda}{\lambda^2}$$

olur. Buradan iki denklem arasından v^2 bilinmeyeni elenirse sonuç olarak

$$\boxed{d\lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos\theta)} \qquad (1.5)$$

bulunur. Buradaki $h/m_e c = 0.0243$ Å değerindeki sabite *elektronun Compton dalgaboyu* denir.

(Bu hesaplamada elektronun relativistik olmadığı varsayımı kullanıldı. İlginçtir, elektronu relativistik hızlarda varsayıp yapılan hesapta da aynı sonuç elde edilmektedir.)

Böylece, ışığın dalga *ve* parçacık özelliği gösterebileceği ispat edilmiş oldu. Bu çift karakter şu iki temel denklemle özetlenebilir:

$$E = h\nu \quad \text{ve} \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

veya, $\hbar = h/2\pi$ ve $\omega = 2\pi\nu$ açısal frekansı ve $k = 2\pi/\lambda$ dalga sayısı kullanılarak yazılırsa

$$\boxed{E = \hbar\omega \quad \text{ve} \quad p = \hbar k} \tag{1.6}$$

Eşitliklerin sağ tarafı dalgasal büyüklükleri, sol taraf ise parçacık özelliği durumunda kullanılacak büyüklükleri vermektedir.

Alıştırma 1.6 : Enerjisi 30 keV olan bir foton serbest bir elektronla çarpıştığında 60° sapmaya uğruyor. (a) Elektronun hangi enerji ve (b) hangi açıyla devam edeceğini bulun.

Çözüm : Önce gelen fotonun dalga boyunu bulalım. (Bu işlemler sırasında hc sabit faktörünün eV ve Å cinsinden değeri olan 12420 sayısını kullanmak kolaylık sağlar). $E = h\nu = hc/\lambda$ olduğundan

$$\lambda = hc/E = 12420/30000 = 0.414 \text{ Å}$$

olur. Compton formülünden fotonun dalgaboyunudaki artışı bulalım:

$$d\lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos\theta) = 0.0243\,(1 - 0.5) = 0.012 \text{ Å}$$

Buradan fotonun yeni dalgaboyu ve enerjisi elde edilir:

$$\lambda' = \lambda + d\lambda = 0.426 \text{ Å}$$

$$E' = \frac{hc}{\lambda'} = \frac{12420}{0.426} = 29.2 \text{ keV}$$

Buna göre, elektronun enerji ve momentumu

$$E_e = 30 - 29.2 = 0.8\text{keV}$$

$$p_e = \sqrt{2m_e E} = \sqrt{2m_e c^2 E}/c = \sqrt{2 \times 511000 \times 800}/c = 28600 \text{ eV}/c$$

olur. Şekil 1.4 deki momentum vektörlerinin çizimine sinüs teoremi uygularsak

$$\frac{p_e}{\sin 60} = \frac{h/\lambda'}{\sin\psi}$$

$$\sin\psi = \sin 60 \frac{h}{\lambda'} \frac{c}{28600} = \frac{0.87 \times 12420}{0.426 \times 28600} = 0.89$$

$$\psi \approx 62^\circ \quad \text{bulunur.}$$

1.4 RUTHERFORD ATOM MODELİ ve BOHR TEORİSİ

Yirminci yüzyıl başlarında atomun yapısı *Thomson Modeli* ile açıklanıyordu. 1897 yılında elektronun varlığını keşfetmiş olan Thomson daha sonra kendi atom modelini ileri

sürmüştü. Bu modele göre, Z sayıda elektron $+Ze$ yüklü bir bulut içinde nötr bir halde bulunabiliyorlardı.

Alfa parçacıklarının ince metal tabakalardan saçılması deneyleriyle uğraşan Ernest Rutherford gözlemlerinin bu modelle uyuşmadığını saptadı. Eğer alfa parçacıkları elektronlar veya pozitif bulut tarafından saçılmış olsaydı bunların kütleleri küçük olduğundan saçılma açıları küçük olmak gerekirdi. Oysa, bazı alfa parçacıkları çok sert bir saçılmaya uğruyor, bazan 180 ° ye yaklaşan açılarda geri gelebiliyorlardı.

Rutherford bu etkinin ancak atom içinde çok yoğun kütleli ve pozitif yüklü bir "çekirdek" tarafından sağlanabileceğini anladı ve yeni bir atom modeli ileri sürdü. Bu modelde, merkezde yoğun kütleli ve $+Ze$ yüklü bir çekirdek ve bunun etrafında dairesel yörüngelerde dönen elektronlar vardır. Elektronlar ile çekirdek arasındaki Coulomb çekimi, atomu bir arada tutan kuvveti oluşturuyordu.

Bu modelin klasik fizik kanunlarına göre ayakta durabilmesi mümkün değildir. Çünkü

- Bu atom kararsız bir denge durumunda olur. Dairesel yörüngede dönmekte olan bir elektron merkezcil ivmeye sahiptir. Klasik elektrodinamiğe göre, ivmeli bir yüklü parçacığın elektromagnetik enerji yayınlaması gerekir. Böylece sürekli enerji kaybeden elektronun gittikçe yavaşlayıp sonunda çekirdeğe düşmesi beklenir.
- Elektronun dairesel hareketi periyodik bir hareket olduğu için, atomların ışıma spektrumlarındaki frekansların da bu dairesel hareket frekansının katları olması beklenir. Oysa, gözlenen dalga boyları şöyle bir bağıntıya göre sıralanıyorlardı:

$$\frac{1}{\lambda} = \text{sabit} \times \left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right] \qquad n,\ m\ =\ 1,2,3,\ldots$$

Bu atom modeli teklif edildikten iki yıl sonra Danimarkalı fizikçi Niels Bohr, klasik fizik kurallarının atom yapısına uygulanamıyacağını varsayıp Rutherford atomunu teorik bir temele oturttu. Tıpkı Planck'ın enerji kuantumunda olduğu gibi atomik enerji seviyelerinin de kuantalanmasını teklif etti. Bohr teorisinin varsayımları şunlardır:

1. Çekirdek etrafında belirli bir yörüngede dönen elektron kararlı bir durumdadır. Bu yörüngede kaldığı sürece elektromagnetik ışıma yapmaz (Kararlı durum hipotezi).
2. Elektron ancak, enerjisi E_1 olan bir kararlı durumdan enerjisi daha düşük bir E_2 durumuna geçiş yaptığında frekansı $\nu = \Delta E/h$ olan bir foton yayınlar.
3. Elektronun dönebileceği yörüngeler açısal momentumun kuantalandığı yörüngelerdir. Açısal momentum L ancak $h/2\pi$ sayısının tam katları olabilir:

$$L = n\frac{h}{2\pi} = n\hbar \qquad n\ =\ 1,2,3,\ldots$$

Bohr teorisinin hidrojen atomu spektrumunu nasıl açıklayabildiğini kısaca görelim:

$+e$ yüklü bir çekirdek etrafında r yarıçaplı bir yörüngede v hızıyla dönen bir elektronun toplam enerjisi

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{r}$$

dir. Burada m elektronun indirgenmiş kütlesidir. 3. Bohr kuralına göre bu elektronun açısal momentumu mvr ancak $\hbar$ nın tam katları olabilir:

$$mvr = n\hbar \qquad (n = 1,2,3,...)$$

Dairesel harekette merkezcil kuvveti sağlayan Coulomb kuvveti olduğundan bu ikisi eşit yazılabilir:

$$m\frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$$

Bu son iki denklemden v ile r değerleri çözülüp enerji denkleminde yerine konulursa

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \qquad (n = 1,2,3,...)$$

bulunur. $n = 1$ e karşılık gelen en düşük enerjili duruma *taban durumu* adı verilir. Şimdi 2.kuralı kullanarak spektrumların frekanslarını bulalım: Elektron yüksek enerjili bir m durumundan daha alçak enerjili bir n durumuna $(m > n)$ atladığında yayınlanan ışının frekansı $\nu = (E_m - E_n)/h$ olacaktır. Buradan, dalgaboyu için $\lambda = c/\nu$ ifadesi kullanarak

$$\boxed{\frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{2\hbar^3 c}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)} \tag{1.7}$$

bulunur. Burada $R = me^4/2\hbar^3 c = 109678 \text{ cm}^{-1}$ değerine *Rydberg sabiti* denir.

Görüyoruz ki Bohr teorisi atomların spektrumlarını açıklamada başarılıdır. Daha sonra Sommerfeld tarafından bu teori geliştirilerek eliptik yörüngeler ve relativistik hızlar hesaba katıldı.

Bu başarılara rağmen Bohr teorisi eski ve yeni fikirlerin bir bileşimi olmaktan öteye gidemezdi. Bohr teorisi açısal momentumun *niçin* kuantalandığını, atomların *neden* geçiş yaptıklarını açıklamıyordu. Bu ve diğer sorunların çözümü için yeni bir kuantum teorisi gerekiyordu.

Alıştırma 1.7 : (a) Bir hidrojen atomunda elektronun en küçük enerjili ($n = 1$) ve bir üstteki ($n = 2$) yörüngelerdeki hızlarını ışık hızı c cinsinden bulun? Bu hızlara karşılık gelen dönme frekansları nelerdir?

(b) ($n = 2 \to n = 1$) geçişinde yayınlanan ışığın frekansı nedir? Bu frekansı (a) da bulunan frekans değerleri ile karşılaştırın?

Çözüm : (a) Yukarda verilen Bohr kurallarına göre

$$mvr = n\hbar$$

ve

$$m\frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$$

denklemleri v için çözülürse

$$r = n^2\frac{\hbar^2}{me^2} = n^2 a_0$$

ve

$$v = \frac{e^2}{n\hbar} = \frac{c}{n}\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{c}{n}\alpha$$

bulunur. Buradaki $a_0 = \hbar^2/me^2 = 0.529$ Å değerine *Bohr yarıçapı* ve boyutsuz $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$ değerine de *ince yapı sabiti* denir.

(Burada sayısal hesaplar konusunda bir kolaylığa değinelim: Yukarda tanımlanan $a_0 = 0.529$ Å ve $\alpha = 1/137$ sabitleri bir kez ezberlenirse diğer büyüklükleri hesaplamak kolaylaşır. Hesaplanacak ifadede pay ve paydalar uygun faktörlerle çarpılarak bu iki sabitden biri veya her ikisi oluşturulabilir.)

Bir dairesel hareketin frekansı $\nu = v/2\pi r$ olduğundan

$$\nu = \frac{me^4}{2\pi\hbar^3}\frac{1}{n^3} = \frac{c\,\alpha}{2\pi a_0 n^3}$$

bulunur. Bu hız ve frekans ifadeleri $n = 1$ ve $n = 2$ için uygulanırsa

$$v_1 = c\alpha = 0.0073c \qquad v_2 = c\alpha/2 = 0.0036c$$

$$\nu_1 = \frac{c\alpha}{2\pi a_0} = 6.6 \times 10^{15} \qquad \nu_2 = \frac{c\alpha}{16\pi a_0} = 0.82 \times 10^{15}\ \text{Hz}$$

bulunur.

(b) Bohr frekansı ifadesi $m = 2 \to n = 1$ geçişi için yazılırsa

$$\nu = c\,R\left(1 - \frac{1}{4}\right) = \frac{3}{4}cR = 0.75 \times 3 \times 10^{10}\text{cm/s} \times 109678\text{cm}^{-1} = 2.5 \times 10^{15}\ \text{Hz}$$

bulunur. Bu sonuca göre gözlenen frekans, iki yörüngedeki klasik frekansların arasında yer almaktadır. Mertebe olarak hepsi aynıdır.

Alıştırma 1.8 : Hidrojen atomunun iyonlaşma enerjisini hesaplayın.

Çözüm : Tanım olarak iyonlaşma, bir elektronun serbest duruma geçmesi demektir. Buna göre $n = 1$ taban durumundan en yüksek enerjili $m = \infty$ durumuna geçiş için gerekli enerji hidrojen atomuna verilmelidir. Bu hesaba göre

$$E_{ion} = -(E_1 - E_\infty) = 13.6\ \text{eV} \qquad \text{olur.}$$

1.5 de BROGLIE HİPOTEZİ ve MADDE DALGALARI

Einstein'ın ışığın parçacık karakteri gösterebileceğini ileri sürmesinden sonra 1924 yılında de Broglie, parçacıkların da uygun koşullarda dalga davranışı gösterebileceğini savundu.

Fotoelektrik olay ve Compton olayından sonra fotonların hem dalga ve hem de parçacık karakteri gösterdiğini biliyoruz. Bu iki karakter

$$E = h\nu \quad \text{ve} \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

denklemleriyle ifade ediliyordu. Relativistik argümanlara dayanan de Broglie elektron gibi parçacıkların da dalga-parçacık ikilemi gösterebileceğini (yani yukardaki iki bağıntının parçacıklar için de geçerli olacağını) savundu. de Broglie varsayımına göre $p = mv$ momentumuna sahip bir parçacığın

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

kadar bir dalgaboyu olması gerekirdi (*de Broglie dalgaboyu*).

Bu madde dalgasının ne tür bir olayda görülebileceğini kendisi de bilmiyordu. Ancak, bu özellik kullanılarak, elektronların atomik yörüngelerinde bir dalga halinde döndükleri ve dairesel yörünge çevresinin bu dalgaboyunun tam katları olması gerektiği varsayılırsa Bohr atom modeli elde edilebiliyordu.

Fakat de Broglie hipotezinin doğrulanması başka bir yönden geldi ve gösterişli bir deneyle gerçekleşti.

1927 yılında Davisson ve Germer nikel kristallerinin yapısını incelerken X-ışınları yerine elektron demetleri kullandıklarında tesadüfen elektronların da tıpkı ışık gibi girişim yapabildiklerini gördüler. *Bragg formülü*ne göre, düzlemleri arasında d uzaklığı bulunan bir kristal şebekeden saçılan dalganın maksimum olduğu açılar

$$2d\sin\theta = n\lambda \qquad (n = 1,2,3,...)$$

olur. Bu formül elektronlar için kullanıldığında de Broglie dalgaboyuyla aynı sonucu verdiği ortaya çıktı.

Bu gelişme, Einstein'ın foton hipoteziyle birlikte, Kuantum Mekaniğinin gelişmesinde büyük bir adım oldu. Görülüyordu ki, en temel düzeyde, madde ve ışık benzer karaktere sahiptirler ve kurulacak bir Kuantum teorisi bu dalga-parçacık ikilemini hesaba katmak zorundadır.

Alıştırma 1.9 : Kinetik enerjileri T olan (birim: eV) bir elektron ile bir protonun de Broglie dalga boylarını (cm cinsinden) bulun.

Çözüm : Dalgaboyu ifadesinde kullanılmak üzere momentumu bulalım. Momentum p ile ve kütle m ile gösterilirse

$$T = p^2/2m$$

olur. $m_e = 9.11 \times 10^{-31}$ kg ve $m_p = 1.675 \times 10^{-27}$ kg alınırsa $\lambda = h/p$ ifadesi

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mT}}$$

$$\lambda_e = \frac{123 \times 10^{-8}}{\sqrt{T}} \text{ cm} \quad \text{ve} \quad \lambda_p = \frac{2.9 \times 10^{-8}}{\sqrt{T}} \text{ cm} \quad \text{olur.}$$

PROBLEMLER

Bu bölümdeki materyel Modern Fizik derslerinde ayrıntılı olarak incelenmektedir. Bu nedenle problemler kısa ve öz olarak geçilecektir.

1.1 *Sıcaklığı 5000 K olan bir karacisim en çok hangi dalgaboyunda ışıma yapar?*

1.2 *Bir nükleer patlamada sıcaklık bir anda 10^7 K olabilmektedir. Maksimum radyasyonun hangi dalgaboyunda geleceğini bulun.*

1.3 *Kobalt elementinden bir elektron koparmak için 3.9 eV enerji gerekir. (a) $\lambda = 5890$ Å olan sarı ışıkta fotolektrik olay gerçekleşir mi? (b) Kobalt için eşik dalgaboyu ne kadardır?*

1.4 *Çinkonun iş fonksiyonu 4.24 eV dur. Dalgaboyu 2000 Å olan bir ışın çinko üzerine düşürülüyor. (a) Eşik dalgaboyu ne kadardır? (b) Koparılan elektronların maksimum kinetik enerjileri ne olur? (c) Düşen radyasyonun ışıma gücü 3.0 W/m^2 ise 1 m^2 alana 1 saniyede düşen foton sayısı ne kadardır?*

1.5 *Enerjisi 8 keV olan bir foton serbest bir elektronla çarpıştığında elektronun alabileceği maksimum enerji ne kadardır?*

1.6 *Dalgaboyu 0.80 Å olan bir foton ardarda iki serbest elektronla çarpışmaya uğruyor. Foton birinci çarpışmada 60° ve ikincide 53° sapıyor. Fotonun son dalgaboyu ne kadardır?*

1.7 *Bağlama enerjisi (yani, serbest hale geçmek için gerekli enerjisi) 0.85 eV olan bir enerji seviyesinde bulunan bir elektron, uyarılma enerjisi (yani, taban durumu ile bu durum arasındaki enerji farkı) 10.2 eV olan bir duruma geçiş yapıyor. (a) Bir enerji diagramında bu olayı gösterin. (b) Yayınlanan fotonun dalga boyunu bulun.*

1.8 *Taban durumundaki bir hidrojen atomu 18.0 eV enerjili bir foton soğuruyor. Serbest kalan elektronun hızını bulun.*

1.9 *Taban durumundaki bir hidrojen atomuna düşen bir foton, atomu iyonlaştırıyor. Serbest kalan elektron, ilk uyarılmış durumunda bulunan başka bir hidrojen iyonuna (yani, protona) rastlayıp bağlı duruma geçiyor ve bu sırada dalgaboyu 466 Å olan bir foton yayınlıyor. (a) Elektronun serbest durumda iken enerjisi ne kadardır? (b) İlk fotonun enerjisi ne kadardır?*

1.10 *20 keV luk bir katot tüpünde hızlandırılmış elektronların de Broglie dalgaboyunu hesaplayın.*

1.11 *20 °C da ortalama termal enerjiye sahip nötronların de Broglie dalgaboyu ne olur? (Not: T sıcaklığında ortalama termal enerji $\frac{3}{2}k_BT$ kadardır.)*

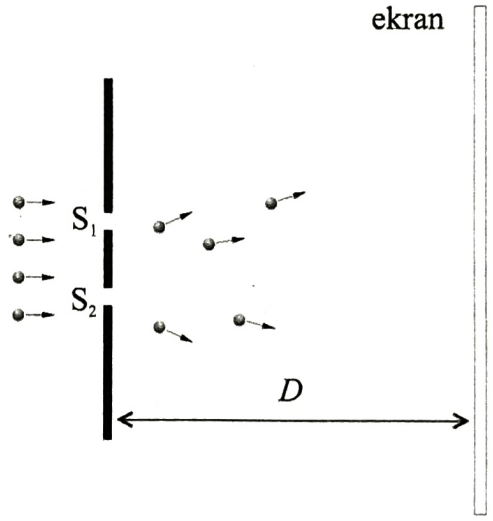
BÖLÜM 2

MADDE ve DALGA

Bu bölümde dalga-parçacık ikilemini inceleyip, mikroskopik parçacıklarda bu iki karakterin nasıl birlikte yeralabileceğini inceleyeceğiz. de Broglie parçacıkların dalga özelliği gösterdiğini ileri sürdükten ve bunun deneyle kanıtlanmasından sonra, yeni kurulacak fiziğin bu özelliği esas alması gerektiği açıktı. Bu varsayımın sonuçları aynı zamanda Kuantum Mekaniği'nin nereden yola çıkması gerektiğine ışık tutacaktır.

2.1 DALGA-PARÇACIK İKİLEMİ

Optik konusundan bilinen Young çift-aralık deneyinde, aynı bir kaynaktan çıkan tek dalgaboylu ışık iki aralıktan geçip bir perde üzerine düştüğünde girişim saçakları oluşuyordu.



Şekil 2.1: Elektronlarla Young çift aralık deneyi.

Şimdi bu deneyi elektronlarla yaptığımızı düşünelim. Şekil 2.1 deki düzenlemede bir kaynaktan çıkan tek enerjili elektronlar S_1 ve S_2 aralıklarından geçerek D uzaklıkta üoresan bir ekran (veya, fotoğraf filmi) üzerine düşmektedirler. S_2 aralığı kapatıldığında, sadece S_1 den geçen elektronların oluşturduğu görüntü şiddetine I_1, sadece S_2 nin açık

- Elektronu bir dalga olarak kabul edelim ve bunu test etmek üzere yine S_0 kaynağının şiddetini iyice azaltalım. Klasik optiğe göre bu durumda girişim saçakları zayıf ama *hemen* oluşmalıdır. Oysa gözleme göre, ekranda başlangıçta tek tek noktalar oluşmaktadır. Ancak uzun süre beklenir ve bu noktalar çoğalırsa girişim saçakları oluşmaktadır. *Girişim olayı, biriken noktasal elektron izlerinin film üzerinde ista-tistiksel dağılımından meydana gelmektedir.* Klasik dalga kavramına göre bu açıklanamaz.
- Bu noktada soruna şöyle bir çözüm düşünülebilir: "İki aralığa da birer elektron detektörü koyalım. Böylece, elektronun iki aralıktan birden mi (dalga), sadece aralıklardan birinden mi (parçacık) geçtiğini saptamış oluruz." Böyle bir düzenlemeyle gerçekten de elektronun aralıklardan birinden (ikisinden birlikte değil) geçtiği detektörde ölçülmektedir. Ancak, dönüp ekrana baktığımızda girişim saçaklarının tamamen kaybolduğu, elektronların klasik parçacık gibi $I_{12} = I_1 + I_2$ dağılımına uyduğu gözlenir! Sanki, bir şeyi ölçmeye çalıştığımızda sistemi değiştirmiş olduk.

Çift-aralık deneyi kuantum fiziğinin en temel yapıtaşını ortaya koymaktadır: mikroskopik nesnelerin dalga-parçacık karakteri. Bu karakteri, elektronu klasik bir parçacık veya klasik bir dalga gibi varsayarak açıklamak olanaksızdır.

Nitekim, 1926 yılında Max Born maddenin dalga özelliğini açıklayan yeni bir düşünce tarzı ileri sürünce, onun fikirlerini geliştiren Niels Bohr ve arkadaşları kuantum mekaniğinin temellerini attılar. Günümüzde "Kopenhag yorumu" diye bilinen bu yoruma göre elektronun davranışı şöyle açıklanabilir:

- Elektron, kaynaktan ekrana kadar uzanan klasik bir dalga değil, daha küçük boyutlarda yer kaplayan bir *dalga paketi*dir. Girişim olayının gerçekleşmesi için, bu dalga paketinin boyutları en az iki aralığı birlikte kapsayacak kadar olmalıdır.
- Bu madde dalgasını karakterize eden bir *dalga fonksiyonu* $\psi(x,t)$ tanımlarsak, *bu dalga fonksiyonu tek bir elektronu değil, aynı kaynaktan çıkan tüm elektronları istatistiksel olarak belirler.* Yani, bir elektron ekranda rasgele bir yere düşebilir. Fakat, uzun süre beklendiğinde elektronların ekranda oluşturdukları noktaların nasıl bir dağılım (girişim saçakları) oluşturacağını bilebiliriz.
- Çift-aralıkta bir dalga gibi davranan elektron üoresan ekrana geldiğinde bu kez bir parçacık gibi etkileşerek enerjisini bir noktada bırakmaktadır. Bu durumu Bohr bir *bütünleme ilkesi* ile açıklamıştır: *Dalga ve parçacık karakterleri bütünleyicidir, İkisi aynı anda gözlenemez. Yapılan ölçümün cinsine göre bu iki karakterden biri gözlenir.* Çift-aralık deneyindeki elektron, hareket ederken dalga, ekranda etkileşirken parçacıktır.
- Elektronun belirli bir yol takip ederek ekrana gittiğini düşünmek yanlıştır. Bu durumu yine Bohr bir *Gözlenirlik İlkesi* ile açıklamıştır: *Bir büyüklük gözlenmediği sürece tanımlanmış değildir.* Girişim deneyinde sadece ekrandaki saçakları inceliyoruz, o halde elektronun hangi yolu izlediği sorusu yersizdir.
- Elektronun yerini tesbit etmeye kalktığımızda ise incelediğimiz sistemi bozmuş oluyoruz. Ölçme kavramına biraz yakından bakalım: Kullandığımız detektör elektronların yolunu bir ışık demetiyle (fotonlarla) aydınlatıyor olsun. Bir elektron

geçtiği anda bu fotonlardan bir kısmı saçılacak ve elektronun yeri belirlenecektir. Ancak, bu sırada elektronun enerji ve momentumu da değişmiş olur ve bu da girişim olayını bozmaya yeterlidir. Klasik fizikte olayların dışında ve onları etkilemeyen bir ölçme kavramı vardı. Kuantum Mekaniğinde her ölçme olayı sistemi etkiler. Bu kavram, daha sonra görüleceği üzere, *Heisenberg belirsizlik ilkesi* adı altında Kuantum Mekaniğinde yer alır.

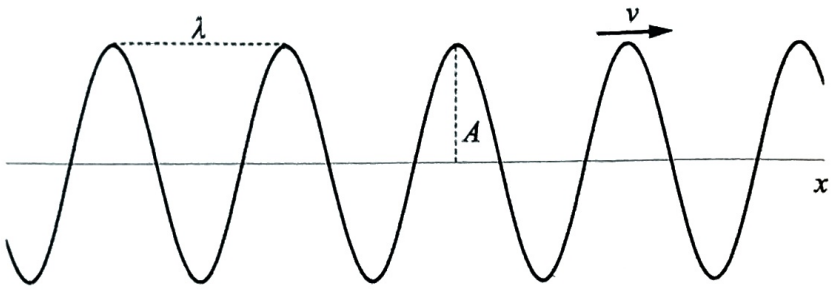
Mikroskopik parçacıkların bir çeşit dalga paketi ile tanımlanması gereği böylece ortaya konulmuş oluyor. Şimdi bu dalganın dinamiğini inceleyelim.

2.2 DALGA PAKETİ

En basit dalga olarak düzlem dalgayı ele alalım. $+x$ yönünde v hızıyla ilerleyen ve dalgaboyu λ olan bir düzlem dalga sinüsel bir fonksiyondur (Şekil 2.4):

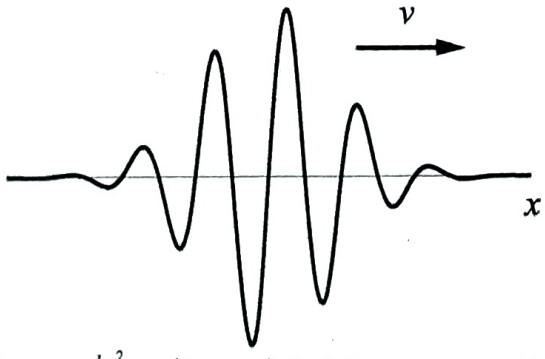
$$\psi(x,t) = A\cos 2\pi\left(\frac{x-vt}{\lambda}\right) = A\cos(kx-\omega t)$$

olur. Burada $k = 2\pi/\lambda$ *dalga sayısı*, $\omega = v/k = 2\pi/T$ ise *açısal frekans* adını alır.



Şekil 2.4: Düzlem dalga.

de Broglie bağıntısına göre bu dalga, momentumu $p = h/\lambda = \hbar k$ kadar olan bir parçacığı temsil edebilir mi? Hayır. Düzlem dalga tüm uzaya yayılmış olduğundan sonlu yer kaplayan bir parçacığı temsil edemez. Bizim aradığımız, sonlu bir bölgede genliği olup diğer bölgelerde genliği sıfır olan bir dalga paketidir. Örneğin, düzlem dalganın genliğini bir gauss eğrisiyle modüle edersek bir dalga paketi oluşur (Şekil 2.5):



Şekil 2.5: $\psi(x,t) = A\,e^{-bx^2}\cos(kx-\omega t)$ fonksiyonunun temsil ettiği dalga paketi.

$$\psi(x,t) = A\,e^{-bx^2}\cos(kx-\omega t)$$

Daha kullanışlı diğer bir yol şudur: çok sayıda farklı dalgaboyunda düzlem dalgalar alıp bunları öyle uygun genliklerle toplarız ki (süperpozisyon), küçük bir bölge hariç, diğer yerlerde birbirlerini yokederler.

Basit bir örnek olmak üzere, dalga sayıları birbirine çok yakın $k_1 = k$ ve $k_2 = k + \Delta k$, ve yine açısal frekansları birbirine çok yakın $\omega_1 = \omega$ ve $\omega_2 = \omega + \Delta\omega$ olan aynı genlikli iki düzlem dalga ele alalım:

$$\begin{aligned} \psi_1(x,t) &= A\cos(kx - \omega t) \\ \psi_2(x,t) &= A\cos\left[(k+\Delta k)x - (\omega + \Delta\omega)t\right] \end{aligned}$$

Bu dalgaların bileşimi ($\cos x + \cos y = 2\cos(x-y)/2\cos(x+y)/2$ bağıntısı kullanarak)

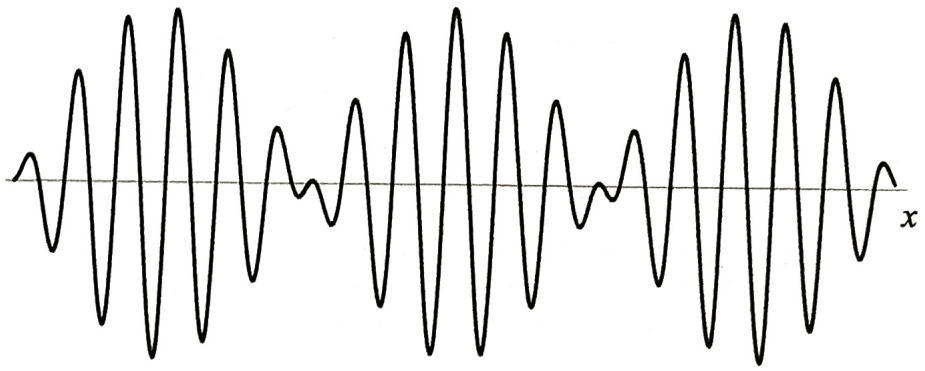
$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= \psi_1(x,t) + \psi_2(x,t) \\ &= A\cos(kx - \omega t) + A\cos[(k+\Delta k)x - (\omega + \Delta\omega)t] \\ &= 2A\cos\left[\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t\right]\cos\left[\frac{2k+\Delta k}{2}x - \frac{2\omega+\Delta\omega}{2}t\right] \end{aligned}$$

olur. $\Delta k \ll 2k$ ve $\Delta\omega \ll 2\omega$ olduğundan, sonuç olarak

$$\psi(x,t) = 2A\cos\left[\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t\right]\cos(kx - \omega t) \tag{2.1}$$

bulunur.

Bu dalga (Şekil 2.6) da x in fonksiyonu olarak $t = 0$ anında gösterilmiştir. $\psi(x,t)$ nin ikinci faktörü ($\cos kx$) bunun yine bir düzlem dalga olduğunu gösteriyor. Ancak birinci faktör ($2A\cos(\Delta k/2)x$) bu kez genliğin periyodik bir zar a modüle olduğunu göstermektedir.



Şekil 2.6: İki dalganın bileşimi.

Klasik dalga konusundan biliyoruz ki burada iki farklı ilerleme hızı sözkonusudur:

1. *Faz hızı*: Düzlem dalganın belirli bir x noktasını ele alalım. $(kx - \omega t)$ faz ifadesi sabit olduğu sürece $\cos(kx - \omega t)$ ifadesi aynı değeri verecek, yani aynı noktanın ilerlemesini takip etmiş olacağız. Bu noktanın hızını hesaplarsak

$$\begin{aligned} kx - \omega t &= \text{sabit} \\ v_f = \frac{dx}{dt} &= \frac{\omega}{k} \end{aligned} \tag{2.2}$$

faz hızını tanımlamış oluruz.

2. *Grup Hızı*: Dalga paketi gerçekte genliği modüle eden zarf tarafından oluşturulmuştur. Bu zarfın ilerlemesi paketin ilerlemesi demektir. Bu paket için yine faz bağıntısı yazılırsa

$$\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t = \text{sabit}$$

$$v_g = \frac{dx}{dt} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$$

grup hızı ifadesi bulunur.

Bu örnekteki dalga paketinin genliği modüle olmuş, fakat yine sonsuza kadar uzanmaktadır. Yerel bir dalga paketi oluşturmak için çok sayıda düzlem dalga kullanmak gerekir. Ancak yukarda verdiğimiz kavramlar, sonsuz sayıda düzlem dalganın süperpozisyonu durumunda da geçerlidir.

Çok sayıda ve genlikleri farklı düzlem dalgaların süperpozisyonu alınırsa:

$$\psi(x,t) = \sum_{k_i} A(k_i)\cos(k_i x - \omega_i t) \tag{2.3}$$

veya, sonsuz sayıda ve birbirlerine yakın dalga sayılı düzlem dalga varsa, bu toplam integral olarak yazılabilir:

$$\psi(x,t) = \int_0^\infty A(k)\cos[kx - \omega(k)t]dk \tag{2.4}$$

Burada ω_i veya $\omega(k)$ dalga paketinin her bir bileşeninin ayrı frekansta olabileceğini gösterir.

Yukarda iki düzlem dalga için verdiğimiz kavramları genişletirsek

$$\boxed{v_f = \frac{\omega(k)}{k} \quad \text{ve} \quad v_g = \frac{d\omega}{dk}} \tag{2.5}$$

faz ve grup hızlarının tanımları olur.

Bu dalga paketinin grup hızına fiziksel bir yorum getirmeden incelememiz tamam sayılmaz. Einstein ve de Broglie'nin verdikleri bağıntılara göre bir parçacığın enerji ve momentumları ile onu temsil eden dalganın parametreleri arasında

$$E = \hbar\omega \quad \text{ve} \quad p = \hbar k$$

bağıntıları vardı. Yukardaki hız ifadelerindeki ω ve k değerleri kullanılırsa

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} \tag{2.6}$$

olur. Momentumu p olan serbest bir parçacık için $E = p^2/2m$ olduğu hatırlanırsa

$$v_g = \frac{d}{dp}\left(\frac{p^2}{2m}\right) = \frac{p}{m} = v$$

olur ki bu da parçacığın gerçek hızıdır. Demek ki de Broglie dalga paketi grubu, temsil ettiği parçacığın hızıyla ilerlemektedir.

Alıştırma 2.1 : Okyanus dalgalarının faz hızı, $v_f = \sqrt{g\lambda/2\pi}$ bağıntısına uymaktadır (g yerçekimi ivmesi). Grup hızını bulun.

Çözüm : Denklem 2.5 ile verilen tanımlara göre, grup hızını hesaplayabilmek için $\omega = \omega(k)$ bağıntısı gerekir. Verilen faz hızı ifadesini $v_f = \omega/k$ şeklinde yazmaya çalışalım. $\lambda = 2\pi/k$ olduğundan

$$v_f = \sqrt{\frac{g\lambda}{2\pi}} = \sqrt{\frac{g}{k}} = \frac{\sqrt{gk}}{k} \quad \longrightarrow \quad \omega = \sqrt{gk}$$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\sqrt{gk})}{dk} = \frac{\sqrt{g}}{2\sqrt{k}} \quad \longrightarrow \quad v_g = \tfrac{1}{2} v_f$$

2.3 FOURIER SERİSİ ve İNTEGRALİ

Bir dalga paketini oluşturan düzlem dalgaları (yani, $A(k_i)$ genliklerini) bulma işlemi matematikte *Fourier serisi analizi* olarak bilinir. Bu tekniğin ana hatlarını kısaca hatırlatalım.

2.3.1 FOURIER SERİSİ

$[-a, a]$ aralığında verilen ve $2a$ periyodu olan bir $\psi(x)$ fonksiyonu

$$\psi(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[a_n \cos\frac{n\pi x}{a} + b_n \sin\frac{n\pi x}{a} \right] \tag{2.7}$$

şeklinde değişik frekanslı sinüs ve kosinüs fonksiyonları cinsinden yazılabilir. Burada amaç a_n ve b_n katsayılarını bulmaktır.

Sinüs ve kosinüs fonksiyonları kompleks fonksiyonlar olarak yazılırsa hesaplarda kolaylık sağlar. Bu amaçla

$$\cos x = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2} \qquad \text{ve} \qquad \sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$$

yazılır ve yeni c_n katsayıları

$$c_0 = a_0 \,, \qquad c_n = \frac{a_n - ib_n}{2} \,, \qquad c_{-n} = \frac{a_n + ib_n}{2}$$

olarak tanımlanırsa, Fourier açılımının kompleks ifadesi

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\pi x/a} \tag{2.8}$$

olur. c_n katsayılarını bulmak için de

$$\boxed{c_n = \frac{1}{2a}\int_{-a}^{a} dx\, \psi(x) e^{-in\pi x/a}}$$

formülü kullanılır. Buradan a_n ve b_n katsayılarına geçmek istenirse

$$a_0 = c_0 \qquad a_n = c_{-n} + c_n \qquad b_n = i(c_n - c_{-n})$$

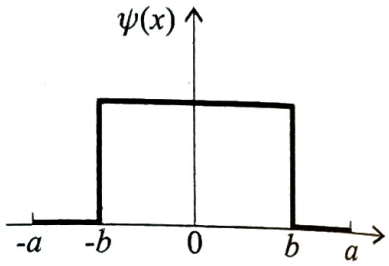
bağıntıları kullanılır. Bunun nasıl yapıldığını bir örnek üzerinde görelim.

Alıştırma 2.2: **Kare dalga.** *$[-a, a]$ aralığında*

$$\psi(x) = \begin{cases} 1 & -b < x < b \\ 0 & b < |x| < a \end{cases}$$

olarak tanımlanan fonksiyonun Fourier açılımını bulun.

Şekil 2.7: Kare dalga.



Çözüm : Şekil 2.7 de grafiği verilen bu kare dalganın $2a$ periyotlu olduğu kabul edilirse

$$\psi(x) = \psi(x + 2a)$$

ve c_n katsayılarını veren bağıntı kullanılırsa

$$c_n = \frac{1}{2a}\int_{-a}^{a} dx\, \psi(x) e^{-in\pi x/a} = \frac{1}{2a}\int_{-b}^{b} dx\, e^{-in\pi x/a} = \frac{e^{in\pi b/a} - e^{-in\pi b/a}}{2in\pi}$$

bulunur. Tekrar reel ifadelere dönülürse ($n = 0$ özel değeri için limit alınır)

$$c_0 = b/a \qquad c_n = \frac{1}{n\pi}\sin\frac{n\pi b}{a}$$

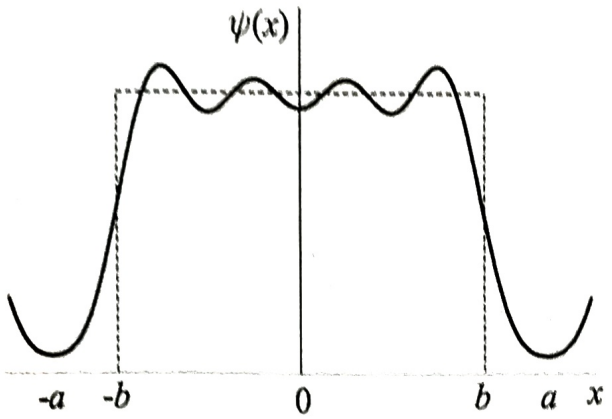
olur. Buradan a_n ve b_n katsayılarına geçilir:

$$a_0 = b/a \qquad a_n = \frac{2}{n\pi}\sin\frac{n\pi b}{a} \qquad b_n = 0$$

Sonuç olarak, verilen fonksiyonun Fourier serisi açılımı

$$\psi(x) = \frac{b}{a} + \frac{2}{\pi}\sin\frac{\pi b}{a}\cos\frac{\pi x}{a} + \frac{2}{2\pi}\sin\frac{2\pi b}{a}\cos\frac{2\pi x}{a} + \cdots$$

şeklinde sonsuz terimli bir seri olarak yazılabilir. Ancak, katsayılar ifadesi gösteriyor ki n arttıkça a_n genlikleri küçülmekte ve dolayısıyla terimlerin katkısı azalmaktadır.



Şekil 2.8: Kare dalganın $n = 5$ alınarak elde edilen Fourier serisi.

Burada önemli bir noktayı vurgulamak üzere sayısal bir örneğe bakalım:

$b = a/4$ olsun. Şekil 2.8 de $n = 5$ tane terim alınarak elde edilen grafik görülmektedir.

Dalga paketinin uzayda kapladığı yere Δx dersek $\Delta x = 2b$ dir. Kullanılan düzlem dalgaların dalga sayıları $k = 0$ dan $k = 5\pi/a$ değerine kadar uzanır. Diğer bir deyişle dalga-sayısı bant aralığı $\Delta k = 5\pi/a$ dır.

Eğer b değerini küçültürsek dalga paketini uzayda daha küçük bir bölgeye sığdırmış oluruz. Ancak, 5 terimli Fourier serisi de $\psi(x)$ fonksiyonunu temsil etmekten o kadar uzaklaşır. Bu durumda daha fazla terim ekleyerek aynı yaklaşıklığı koruyabiliriz. Yani, dalga sayısı band aralığı Δk yı artırmak gerekir.

Bu gözlem tüm dalga paketlerinin ortak özelliği olup Fourier analizindeki bir teoremin ifadesidir. İspat etmeden vereceğimiz bu teoreme göre, *dalga paketinin uzayda kapsadığı yer Δx ne kadar küçülürse Fourier serisinde kullanılan dalgaların k uzayında yayılışı Δk da o kadar büyük olur*:

$$\Delta x \, \Delta k \geq 1/2$$

2.3.2 FOURIER İNTEGRALİ

Fourier serisi analizinde, verilen fonksiyonun $2a$ aralığında periyodik olduğunu kabul etmek gerekmişti. Oysa, dalga paketi periyodik değildir, çünkü temsil ettiği parçacık uzayın bir bölgesinde bulunmaktadır. Örneğin,

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{-x^2/2b^2} \cos kx$$

şeklinde bir dalga paketi $x = 0$ noktası civarında $\pm b$ kadar bir aralıkta yerelleşmiş bir parçacığı temsil edebilir. Böyle bir dalga paketi için $\psi(x) = \psi(x + 2a)$ koşulunu sağlayabilecek bir a değeri bulmak imkansızdır.

Bu durumda, $2a$ periyodunun sonsuz olduğunu ileri sürerek bir önceki kısımda yapılan analizi tekrar edebiliriz. Yapılacak iş $a \to \infty$ limitini dikkatlice almaktır.

Önce $k_n = n\pi/a$ dalgasayılarını tanımlayalım ($n = 1,2,3,\ldots$). Ardışık k_n değerleri arasındaki fark $\delta k = \pi/a$ olur. Fourier serisi ifadelerini tekrar yazalım:

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\pi x/a} \quad , \quad c_n = \frac{1}{2a}\int_{-a}^{a} dx' \psi(x') e^{-in\pi x'/a}$$

(daha sonra karışıklığa yol açmamak için c_n ifadesi içinde x' değişkeni kullanıyoruz). Şimdi c_n ifadesi içinde k_n ve δk yı oluşturalım:

$$c(k_n) = \frac{\delta k}{2\pi}\int_{-a}^{a} \psi(x') e^{-ik_n x'} dx'$$

Bunu ψ için kullanalım:

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\left[\delta k\, e^{ik_n x}\int_{-a}^{a} dx'\ \psi(x') e^{-ik_n x'}\right]$$

olur.

Şimdi $a \to \infty$ limitine bakalım. Bu durumda k_n dalga sayıları arasındaki fark olan $\delta k = \pi/a$ da sıfıra gider ($\delta k \to 0$) ve toplama işlemi integral olarak yazılabilir:

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\, e^{ikx}\int_{-\infty}^{+\infty} dx' \psi(x') e^{-ikx'}$$

Bu bağıntı *Fourier integral teoremi* olarak bilinir. c_n katsayılarının yerini tutmak üzere bir $\phi(k)$ *genlik dağılım fonksiyonu*

$$\boxed{\phi(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \psi(x)\, e^{-ikx}} \tag{2.9}$$

tanımlarsak

$$\boxed{\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi}\,\phi(k)\, e^{ikx}} \tag{2.10}$$

olur. Bu iki ifade arasındaki simetri gözönüne alındığında $\phi(k)$ fonksiyonu $\psi(x)$ in *Ters Fourier dönüşümü* (veya, *Ters Fourier transformu*) demektir. (2π faktörü bazı kitaplarda ψ ve ϕ arasında $\sqrt{2\pi}$ olarak eşit bölüşerek yazılırsa da, fizikte en yaygın olanı k integraliyle birlikte kullanmaktır).

Yukardaki ifade dalga paketinin $t = 0$ anındaki durumunu verir. Bu ifade ilerleyen bir dalga haline nasıl getirilebilir? Klasik dalga teorisinden biliyoruz ki v hızıyla ilerleyen bir dalganın argümanı $x \pm vt$ şeklinde olmalıdır. $x + vt$ durumu, dalganın $-x$ yönünde; $x - vt$ ise $+x$ yönünde ilerlediğini gösterir. Fourier transformu içindeki her bir k-bileşeni v_f faz hızıyla ilerlediğine göre üstel fonksiyonda $kx \to k(x - v_f t)$ değişikliği yaparak ($v_f = \omega/k$ tanımını da kullanarak) en genel dalga paketi ifadesini bulmuş oluruz:

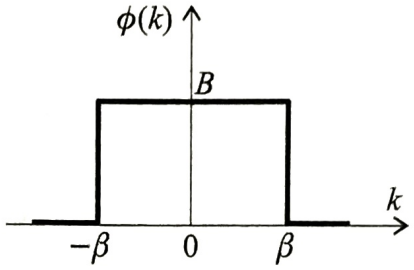
$$\boxed{\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi}\,\phi(k)\, e^{i(kx-\omega t)}} \tag{2.11}$$

Dalganın zaman içindeki gelişmesiyle ilgilenmiyorsak bu ifadede $t = 0$ yapmak yeterlidir.

Böylece, periyodik olmayan bir fonksiyonu (yani, gerçek bir dalga paketini) düzlem dalgaların (e^{ikx}) toplamı (süperpozisyonu) olarak yazmış olduk. Bu kez, seri açılımındaki kesikli k_n değerleri yerine, sürekli bir k değişkeni kullanmak ve dağılım fonksiyonu $\phi(k)$ yı bilmek gerekir. Fourier integraline geçiş işlemi sırasında k değişkeninin eksi değerler de alabileceğini kabul etmiş olduk. Bu bir sorun yaratmaz, çünkü $e^{i(kx-\omega t)}$ fonksiyonu $+x$ yönünde ilerleyen bir düzlem dalgayı temsil ediyorsa, $e^{i(-kx-\omega t)}$ fonksiyonu da $-x$ yönünde ilerleyen bir düzlem dalgayı temsil edecektir.

Alıştırma 2.3 : Dalgasayısı $[-\beta,+\beta]$ aralığında sürekli değişen ve genlikleri B ye eşit olan düzlem dalgaların oluşturduğu dalga fonksiyonunu bulun.

Şekil 2.9: $\phi(k)$ genlik dağılım fonksiyonu.



Çözüm : Şekil 2.9 da gösterilen genlik dağılım fonksiyonu

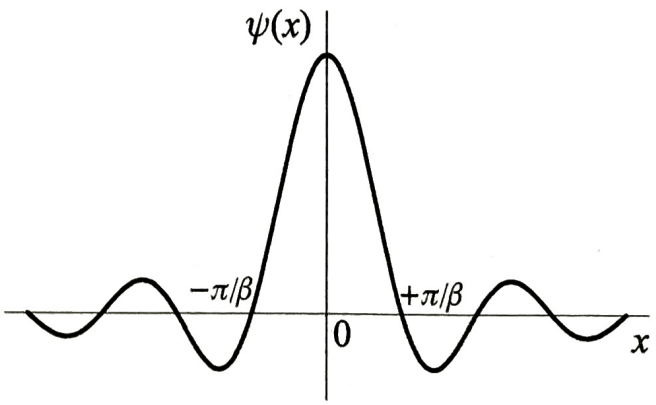
$$\phi(k) = \begin{cases} B & -\beta < k < \beta \\ 0 & \beta < |k| \end{cases}$$

olarak yazılır. Bu fonksiyonun ters Fourier transformu

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\, \phi(k)\, e^{ikx} = \frac{B}{2\pi}\int_{-\beta}^{+\beta} dk\, e^{ikx} = \frac{B}{2\pi}\left[\frac{e^{ikx}}{ix}\right]_{k=-\beta}^{k=\beta}$$

$$\psi(x) = \frac{B}{\pi}\frac{\sin\beta x}{x} \quad \text{olur.}$$

Bu dalga paketi Şek. 2.10 da gösterilmiştir.



Şekil 2.10: $\psi(x)$ dalga paketi.

2.4 BELİRSİZLİK İLKESİ

Dalga paketi ifadesi olarak bulunan

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\, \phi(k)\, e^{ikx}$$

fonsiyonunun temel bir özelliği, uzayda sonlu bir yeri kapsamasıdır. Bu sonlu aralığa x konumunun *standard sapması* Δx dersek, $\Delta x > 0$ olur. Başka bir deyişle, parçacığın konumu Δx kadar belirsizdir.

Benzer şekilde, $\phi(k)$ genlik dağılım fonksiyonunun da bir standart sapması Δk vardır. Fourier dönüşümünün özelliği dolayısıyla bu iki standard sapma arasında $\Delta x \Delta k \geq 1/2$ bağıntısı olduğunu görmüştük. Bu saptamanın fiziksel sonucu olarak parçacığın momentumu da belirsiz olur. de Broglie bağıntısı $p = \hbar k$ ya göre momentumun standard sapması $\Delta p = \hbar \Delta k$ olmalıdır. Buradan *Heisenberg Belirsizlik İlkesi* denilen bağıntı yazılabilir:

$$\boxed{\Delta x\, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}} \qquad (2.12)$$

Burada dikkat edilmesi gereken nokta şudur: Δx ile Δk arasındaki belirsizlik ilişkisi tamamen Fourier dönüşümünün matematiksel bir özelliğidir. Bunun, parçacığın momentumundaki Δp belirsizliğine karşılık geldiğini söylemek fiziksel bir yorum olup Kuantum Mekaniğinin temelini oluşturur. Heisenberg tarafından ortaya konan bu ilkeye göre, *bir parçacığın konumu ile momentumunu aynı anda sonsuz duyarlıkta bilebilmek imkansızdır.*

Bu imkansızlık, kullandığımız deneysel aygıtların yetersiz oluşundan ileri gelmez. Ölçme işleminin kendisi bundan sorumludur. Örneğin, parçacığın konumunu ölçme işlemini gittikçe daha duyarlı hale getirmeye çalıştığımızda, momentumunu da o ölçüde bozarız, belirsiz hale getiririz.

Daha sonra görüleceği üzere, Belirsizlik İlkesi çok daha genel bir ilke olup, diğer fiziksel büyüklükleri (enerji, açısal momentum,...) de kapsar. Burada enerjideki belirsizliğe kısaca değinelim.

Momentumundaki belirsizlik Δp olan serbest bir parçacığın E kinetik enerjisindeki belirsizlik (diferansiyel alma kuralları uygulanırsa)

$$\Delta E = \Delta\left(\frac{p^2}{2m}\right) = \frac{2p\,\Delta p}{2m} = v\,\Delta p$$

olur.

Bir dalga paketi belirli bir noktadan v hızıyla geçerken, geçiş anı olan t deki Δt belirsizliği, dalga paketinin hızı ve konumundaki belirsizliğe bağlıdır: $v\Delta t = \Delta x$ (yani, dalga paketinin tamamı geçinceye kadar ölçtüğümüz zaman belirsizdir).

Bu iki belirsizliğin çarpımına bakıldığında

$$\Delta E\, \Delta t = v\Delta p \frac{\Delta x}{v} = \Delta p\, \Delta x$$

ve Heisenberg ilkesine göre

$$\Delta E\, \Delta t \geq \hbar/2 \tag{2.13}$$

olduğu görülür. Bu bağıntıya *enerji-zaman belirsizlik bağıntısı* denir. Burada $E = p^2/2m$ bağıntısını kullanarak sadece serbest parçacıklar için sınırlı bir ispat verdik. Bu bağıntı daha genel olup, bir kararsız parçacığın yarıömrü, bir salınıcının periyodu için de kullanılabilir. (Gerçekte, enerji-zaman belirsizliği çok farklı karakterde bir olaydır; bu konuya Kısım 5.4 de tekrar değineceğiz.)

Alıştırma 2.4 : Bir atomun uyarılmış bir enerji düzeyindeki yarıömrü 1.6×10^{-8} saniyedir. Bu atom taban durumuna indiğinde 8000 Å dalgaboylu bir foton yayınladığında fotonun enerjisindeki ve dalgaboyundaki belirsizlikleri hesaplayın.

Çözüm : Yarıömür değeri zamandaki belirsizliktir: $\Delta t = 1.6 \times 10^{-8}$ s. Buradan enerjideki belirsizlik

$$\Delta E = \frac{\hbar}{2\Delta t} = \frac{6.58 \times 10^{-16}}{3.2 \times 10^{-8}} = 2.1 \times 10^{-8}\,\text{eV}$$

olur. Enerji ile dalgaboyu arasındaki bağıntı kullanılarak $\Delta\lambda$ belirsizliği hesaplanırsa

$$\begin{aligned} E &= \frac{hc}{\lambda} \\ \Delta E &= \Delta\left(\frac{hc}{\lambda}\right) = \frac{hc\Delta\lambda}{\lambda^2} \\ \Delta\lambda &= \frac{\lambda^2}{hc}\Delta E = \frac{8000^2}{12420} 2.1 \times 10^{-8} \approx 0.0001\ \text{Å} \end{aligned}$$

bulunur.

Alıştırma 2.5 : Bir elektron çekirdek boyutlarında ($\sim \pm$ 5 fm) bir bölgeye kapatılmıştır. (a) Elektronun momentumundaki belirsizliği bulun. (b) Bu Δp değerini elektronun sahip olacağı minimum momentum olarak düşünüp elektronun minimum enerjisini bulun.

Çözüm : Konum ve momentum arasındaki belirsizlik ilkesi yazılırsa

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta p &\geq \hbar/2 \\ \Delta p &\geq \hbar/(2\Delta x) \end{aligned}$$

olur. Çekirdek fiziği hesaplarında MeV ve fermi birimleri kullanımı kolaylık sağlar. Buna göre, $\hbar c \approx 200$ MeV fm sabiti oluşturulursa

$$\Delta p \geq \frac{\hbar c}{2c\Delta x} = \frac{200}{10c} = 20\ \text{MeV/c}$$

bulunur.

(b) En küçük elektron momentumu sıfır olsa bile belirsizliği $\Delta p \geq 20$ MeV/c olacaktır. O halde bir alt limit bulabilmek üzere $p \approx \Delta p = 20$ MeV/c alalım. Bu momentuma karşılık gelen hız çok yüksek olduğundan, enerji ifadesi için relativistik bağıntı kullanmak

zorunludur:

$$\begin{aligned} E &= \sqrt{(m_0c^2)^2 + p^2c^2} \\ &= \sqrt{0.511^2 + 20^2} \\ E &= 20\,\text{MeV} \end{aligned}$$

Bu minimum enerji değeri, çekirdek ölçülerine göre çok büyüktür ve çekirdek içinde elektron bulunamıyacağına kuvvetli bir kanıttır.

PROBLEMLER

2.1 *Bir dalga paketinin grup ve faz hızları arasında*

$$v_g = v_f - \lambda \frac{dv_f}{d\lambda}$$

bağıntısı olduğunu gösterin.

2.2 *Derin suda oluşan dalgaların faz hızı*

$$v_f = \sqrt{\frac{2\pi\gamma}{\rho\lambda}} = \frac{\text{sabit}}{\sqrt{\lambda}}$$

bağıntısıyla belirlenmiştir. Suda oluşan dalga paketinin grup hızı ifadesini bulun.

2.3 *Serbest bir parçacık için relativistik enerji bağıntısı* $E = mc^2$ *kullanıldığında grup ve faz hızları arasında*

$$v_f = \frac{c^2}{v_g}$$

bağıntısı olduğunu gösterin. Parçacık için $v_g < c$ *olduğuna göre* $v_f > c$ *oluşunun fiziksel bir anlamı var mıdır?*

2.4 *Bir iletken kanal içindeki elektromagnetik dalgaların dalgaboyu ile frekansı arasında*

$$\lambda = \frac{c}{\sqrt{\nu^2 - \nu_0^2}}$$

bağıntısı vardır. Burada c ışık hızı, ν_0 *sabit bir karakteristik frekanstır. Bu dalgaların faz ve grup hızları ne olur?*

2.5 $[-a,a]$ *aralığında tanımlanan aşağıdaki fonksiyonların Fourier seri açılımını hesaplayın:*

(a) $f(x) = x$, (b) $f(x) = |x|$, (c) $f(x) = \mathrm{e}^{-|x|/a}$

2.6 *Aşağıdaki fonksiyonların Fourier transformunu hesaplayın:*

(a) $f(x) = \begin{cases} x & |x| < 1 \text{ ise} \\ 0 & |x| \geq 1 \text{ ise} \end{cases}$ (b) $f(x) = \begin{cases} |x| & |x| < 1 \text{ ise} \\ 0 & |x| \geq 1 \text{ ise} \end{cases}$

(c) $f(x) = \begin{cases} 1 - |x| & |x| < 1 \text{ ise} \\ 0 & |x| \geq 1 \text{ ise} \end{cases}$

2.7 *Genlik dağılımı* $\phi(k) = e^{-b|k|}$ *olan dalga fonksiyonunun*

$$\psi(x) = \frac{b}{\pi} \frac{1}{x^2 + b^2}$$

olduğunu gösterin.

2.8 *Gauss dalga paketi*

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} e^{-x^2/2\Delta^2}$$

nin Fourier transformu $\phi(k)$ *nın da yine bir Gauss dağılımı oluşturduğunu gösterin.*

2.9 *Bir metaldeki iletkenliği sağlayan elektronlar metal içinde her yere serbestçe gidebilirler. Bir kenarı 1 cm olan küp şeklinde bir bakır parçası gözönüne alın. (a) Metal içindeki bir elektronun momentumunun her bileşeni için belirsizlik ne kadardır? (b) Böyle bir elektronun kinetik enerjisindeki belirsizlik ne olur?* ($\Delta p^2 = \Delta p_x^2 + \Delta p_y^2 + \Delta p_z^2$ *olduğunu varsayın.) (c) Bakırın özgül ısısı 25 J/mol.K dır. Oda sıcaklığında bakır için bu belirsizliğin özgül ısıya katkısını hesaplayıp önemli olup olmadığına karar verin (Özgül ısıya katkı* $\Delta E/T$ *olarak alınabilir).*

2.10 *Tek boyutlu bir harmonik salınıcının enerjisi* $E = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$ *dir. Belirsizlik ilkesine dayanarak bu salınıcının minimum enerjisinin*

$$E_{\min} \approx \hbar\omega/2$$

olduğunu gösterin (Yol gösterme: Enerjiyi ifadesine göre hem *p ve* hem de *x minimum olmalıdır ve en olumsuz durumda* $\Delta p \sim p$ ve $\Delta x \sim x$ *alınabilir.)*

2.11 *Kararsız bir elementer parçacık olan* π^+ *mezonunun yarıömrü* 2.6×10^{-8} *s ve durgun enerjisi* $E_0 = mc^2 = 140$ *MeV dir. (a) Bu parçacığın durgun enerji değerindeki bağıl hatayı* ($\Delta E/E$) *bulun. (b) Bu işlemi, durgun enerjisi 765 MeV ve yarıömrü* 4.4×10^{-24} *s olan* ρ *mezonu için tekrar edin.*

2.12 *Kararsız* Δ *parçacığının durgun enerjisi 1236 MeV olup standard sapması 120 MeV dir. Bu parçacığın yarıömrü en az ne kadar olabilir?*

BÖLÜM 3

SCHRÖDİNGER DENKLEMİ

Klasik mekanikte bir parçacığın *durumu*, x konumu ve p momentumu ile belirlenmiştir. Diğer büyüklükler (hız, enerji, açısal momentum,...) buradan hesaplanabilir. Parçacığın durumunun zaman içinde nasıl geliştiği ise Newton'un 2. Yasası $\vec{F} = m\vec{a}$ ile belirlenir. Bu bir *hareket denklemi*dir; yani, $t = 0$ anındaki konum ve momentum biliniyorsa bu diferansiyel denklemin çözümü bize t anındaki konum ve momentumun ne olacağını bildirir.

Bir önceki bölümde, parçacıkların dalga paketleriyle temsil edilmesi gerektiğini görmüştük. Bu dalga fonksiyonu kuantum mekaniğinde temel büyüklüktür. Bu bir postüla olarak verilir:

Kuantum Mekaniğinin 1. Postülası: *Bir fiziksel sistemin belirli bir t anındaki durumu $\psi(\vec{r},t)$ dalga fonksiyonu ile belirlenir.*

Diğer 3 postüla sırası geldiğinde verilecektir.

Parçacığın bir t anındaki durumu $\psi(\vec{r},t)$ dalga fonksiyonu ile belirlendikten sonra, bu durumun zaman içindeki gelişmesi nasıl olacaktır? Yani, klasik mekanikteki $\vec{F} = m\vec{a}$ benzeri dinamik bir dalga denklemi var mıdır?

Dalga paketleriyle daha önce yaptığımız incelemenin ışığında, böyle bir denklemin şu özelliklere sahip olması gerektiği ortaya çıkar:

- Bu denklem enerji korunumu yasasına uymalıdır. Klasik fizikteki bu kavramın yeni teoride de geçerli olması gerekir.
- Bu denklem, ψ fonksiyonunun *lineer* ve *homojen* bir diferansiyel denklemi olmalıdır. Ancak bu tür denklemlerin çözümleri, dalgaların toplanabilirlik (süperpozisyon) özelliğine sahip olurlar. Başka bir deyişle, ψ_1 ve ψ_2 lineer ve homojen bir denklemin çözümleri ise $\psi_1 + \psi_2$ lineer kombinasyonu da aynı denklemin çözümü olma özelliğine sahiptir. Aksi takdirde, parçacığın dalga özelliğini açıklayamaz.

- Bu denklem, t zaman değişkenine göre birinci dereceden bir diferansiyel denklem olmalıdır. Böyle olursa, parçacığın $t = 0$ anında $\psi(x,0)$ durumu verildiğinde, daha sonraki bir t anındaki $\psi(x,t)$ durumu bulunabilir (daha yüksek dereceli denklemlerde birden çok başlangıç koşulu gerekirdi).
- Dalga denkleminin verdiği çözümler, uygun limitlerde, klasik mekaniğin sonuçlarıyla uyum içinde olmalıdır. Buna *Karşılığı bulunma ilkesi* denir. Bu noktaya daha sonra döneceğiz.

Bu koşullar, Schrödinger dalga denklemini doğal bir şekilde "kurabilme" olanağını sağlar. Ancak bunun kesin bir ispat olmadığını vurgulayalım: Aynı koşullara uyan başka denklemler de bulunabilirdi. Schrödinger denklemi deneysel gözlemlerle uyumlu sonuçlar verdiği ölçüde "doğru" olabilmiştir. Bugün bile başka arayışlar devam etmektedir. Ama, aradan geçen 60 küsur yıl içinde bu denklemle çelişen bir gözlem bulunamamıştır.

3.1 OPERATÖR KAVRAMI

$\psi(x,t)$ nin t ye göre kısmi türevi olan $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ fonksiyonunu gözönüne alalım. Bu türev işlemine başka bir açıdan bakarak, $\frac{\partial}{\partial t}$ gibi bir *operatör*ün ψ ye etki ederek yeni bir $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ fonksiyonu verdiği düşünülebilir. Daha basit bir durumda, $x^2\psi$ çarpımı dahi x^2 operatörünün ψ fonksiyonuna etkimesi ve $x^2\psi$ yi oluşturması demektir.

Genel bir tanımla, dalga fonksiyonlarının oluşturduğu uzayda bir operasyon, ψ fonksiyonuna başka bir ψ' fonksiyonu karşılık getiriyorsa, bunun bir $\hat{A}$ operatörünün etkisiyle oluştuğu kabul edilir ve

$$\psi' = \hat{A}\psi$$

yazılır.

Eğer ψ lerin lineer kombinasyonu üzerine etkisi

$$\hat{A}\,(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(\hat{A}\psi_1) + c_2(\hat{A}\psi_2)$$

gibi bir dağılım özelliğine sahipse $\hat{A}$ bir *lineer operatör*dür.

İki operatörün bir dalga fonksiyonuna etkisi $\hat{A}\hat{B}\psi$ yazıldığında, önce en sağdaki $\hat{B}$ operatörünün etkiyeceği ve bunun sonucuna $\hat{A}$ operatörünün etkiyeceği kararlaştırılır:

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi) = \hat{A}\psi' = \psi''$$

İki operatörün birlikte etkimesi halinde sıralama önemlidir; $\hat{A}\hat{B}$ her zaman $\hat{B}\hat{A}$ ya eşit olmayabilir. Örnek olarak, $\hat{A} = \frac{d}{dx}$ türev operatörü ile $\hat{B} = f(x)$ gibi bir fonksiyon alalım:

$$\begin{aligned}\hat{A}\hat{B}\psi(x) &= \frac{d}{dx}\,[f(x)\psi(x)] \\ &= \left(\frac{df}{dx}\right)\psi + f(x)\frac{d\psi}{dx}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{B}\hat{A}\psi(x) &= f(x)\frac{d}{dx}\psi \\ &= f(x)\frac{d\psi}{dx}\end{aligned}$$

Burada türev için $d(u.v) = v\,du + u\,dv$ özelliğini kullandık. Görüldüğü gibi, $\hat{B}\hat{A} \neq \hat{A}\hat{B}$ olmaktadır.

$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ farkı da yine bir operatördür; buna $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ nin *komütatörü* denir ve

$$[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{3.1}$$

olarak yazılır. Yukardaki örnekte

$$[\hat{A},\hat{B}]\,\psi = \hat{A}\hat{B}\psi - \hat{B}\hat{A}\psi = \left(\frac{df}{dx}\right)\psi$$

olduğuna göre

$$\left[\frac{d}{dx}, f(x)\right] = \frac{df}{dx}$$

olur.

Alıştırma 3.1: *Aşağıdaki operatörlerden hangileri lineer operatördür?*

(a) $\hat{A}\psi = \psi^*$

(b) $\hat{B}\psi = \psi^2$

(c) $\hat{C}\psi = \dfrac{d\psi}{dx}$

(d) $\hat{D}\psi = \dfrac{1}{\psi}$

Çözüm: Lineer operatör olmanın ölçüsü $\hat{O}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(\hat{O}\psi_1) + c_2(\hat{O}\psi_2)$ bağıntısıdır. Buna göre (bazı bağıntılarda özel c değerleri kullanırsak):

(a) $\hat{A}(c\psi) = c^*(\hat{A}\psi) \neq c(\hat{A}\psi)$ olduğundan $\hat{A}$ lineer bir operatör değildir.

(b) $\hat{B}(\psi_1 + \psi_2) = (\psi_1 + \psi_2)^2 = \psi_1^2 + 2\psi_1\psi_2 + \psi_2^2 = (\hat{B}\psi_1) + (\hat{B}\psi_2) + 2\psi_1\psi_2 \neq (\hat{B}\psi_1) + (\hat{B}\psi_2)$
olduğundan $\hat{B}$ lineer değildir.

(c) $\hat{C}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\dfrac{d\psi_1}{dx} + c_2\dfrac{d\psi_2}{dx} = c_1\hat{C}\psi_1 + c_2\hat{C}\psi_2$
olduğundan $\hat{C}$ lineer operatördür.

(d) $\hat{D}(c\psi) = \dfrac{1}{c\psi} = \dfrac{1}{c}\hat{D}\psi \neq c\hat{D}\psi$ olduğundan $\hat{D}$ lineer değildir.

Alıştırma 3.2: *Aşağıdaki operatörlerin komütatörlerini bulun:*

(a) $[d/dx, x^3]$, *(b)* $[x^2, d^2/dx^2]$

Çözüm : (a)

$$[\frac{d}{dx},x^3]\psi = \frac{d}{dx}(x^3\psi) - x^3\frac{d\psi}{dx}$$
$$= 3x^2\psi + x^3\frac{d\psi}{dx} - x^3\frac{d\psi}{dx} = 3x^2\psi$$

ve $$[\frac{d}{dx},x^3] = 3x^2 \quad \text{olur.}$$

(b) Benzer şekilde,

$$[x^2,\frac{d^2}{dx^2}]\psi = x^2\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{d^2}{dx^2}(x^2\psi) = x^2\frac{d^2}{dx^2} - \frac{d}{dx}\left(2x\psi + x^2\frac{d\psi}{dx}\right)$$
$$= x^2\frac{d^2}{dx^2} - 2\psi - 2x\frac{d\psi}{dx} - 2x\frac{d\psi}{dx} - x^2\frac{d^2\psi}{dx^2}$$

ve $$[x^2,\frac{d^2}{dx^2}] = -2 - 4x\frac{d}{dx} \quad \text{olur.}$$

3.2 SCHRÖDİNGER DALGA DENKLEMİ

Tek boyutlu x-uzayında momentumu p ve kütlesi m olan bir parçacığı gözönüne alalım. Parçacık serbest, yani bir potansiyel içinde değilse, toplam enerjisi

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

olarak sadece kinetik enerjiden ibarettir. Bu parçacığı de Broglie bağıntılarına göre temsil eden dalga paketinin dalga sayısı k ve açısal frekansı ω cinsinden enerji ve momentumu yazılırsa

$$p = \hbar k \qquad \text{ve} \qquad E = \hbar\omega$$

olmalıdır.

Bir dalga paketinin düzlem dalgalar cinsinden Fourier açılımının

$$\psi(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(k)e^{i(kx-\omega t)}dk$$

şeklinde yazılabildiğini görmüştük (bkz. Denklem 2.11). Bu ifadede enerji ve momentum kullanılırsa

$$\psi(x,t) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(p)e^{i(px-Et)/\hbar}dp$$

olur. Şimdi bu ifadenin zamana göre 1.türevini ve konuma göre de 2. türevini alıp inceleyelim:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-i}{2\pi\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}E\,\phi(p)e^{i(px-Et)/\hbar}dp$$
$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{-1}{2\pi\hbar^3}\int_{-\infty}^{\infty}p^2\,\phi(p)e^{i(px-Et)/\hbar}dp$$

Bu iki ifade karşılaştırılırsa, $E = p^2/2m$ bağıntısının her bir düzlem dalga bileşeni için sağlanabileceği görülür. Bunun için, herbir ifade uygun katsayılarla çarpıldığında

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \tag{3.2}$$

olması gerektiği anlaşılır. *Schrödinger serbest parçacık denklemi* denilen bu kısmi diferansiyel denklem yukarda bahsedilen koşulları (lineerlik, zamana göre 1.türev ve klasik $E = p^2/2m$ bağıntısını verebilmesi) sağlamaktadır.

Schrödinger denklemindeki kısmi türevler $E = p^2/2m$ bağıntısını sağlayabilmek için alınmıştı. Operatör kavramı açısından bakıldığında, enerji ve momentum operatörleri

$$\begin{aligned} E &\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \\ p^2/2m &\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \\ p &\rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \end{aligned}$$

tanımlanırsa, Schrödinger denklemi $E = p^2/2m$ bağıntısının kuantumsal ifadesinden başka birşey değildir.

Şimdi, sabit bir V potansiyeli içinde hareket eden bir parçacığı ele alalım. Bu parçacığın toplam enerjisi

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

olur. Yine, de Broglie bağıntıları $E = \hbar\omega$ ve $p = \hbar k$ kullanılırsa

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V$$

olmalıdır. Yukarda verilen kısmi türevlerin yine bu eşitliği sağlaması isteniyorsa

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi(\vec{r},t)$$

olur. Bu denklem iki yönden genelleştirilebilir: Üç boyutlu uzayda momentum vektörü $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ ye karşılık gelen bir $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ dalgasayısı vektörü tanımlanırsa, dalga paketi ifadesi

$$\psi(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \phi(\vec{k})\mathrm{e}^{i(\vec{k}.\vec{r}-\omega t)}d^3k$$

olur. Burada $\vec{k}.\vec{r} = k_x x + k_y y + k_z z$ skaler çarpımdır. Bu kez $E = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m + V$ olacağından üç tane kısmi türev alınıp toplanırsa

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + V\psi(\vec{r},t)$$

bulunur.

İkinci olarak, konuma ve zamana göre kısmi türevleri alırken bu ifadede V potansiyelinin sabit olduğunu varsaymıştık (aksi takdirde, p momentumu da değişken olurdu ve türevinin alınması gerekirdi). Bu denklemin $V(\vec{r},t)$ gibi *hem t zamanına ve hem de $\vec{r}$ konumuna bağlı* bir potansiyel için de geçerli olduğunu varsayarsak *Schrödinger dalga denklemini* elde etmiş oluruz.

Bu, kuantum mekaniğinin 2. postülası dır: *Bir sistemin $\psi(\vec{r},t)$ dalga fonksiyonunun zaman içindeki gelişmesi Schrödinger denklemi ile belirlenir:*

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)} \qquad (3.3)$$

Burada

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

ifadesiyle *laplasyen* operatörü ve toplam enerji E nin diferansiyel şekli olan

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

hamiltonyen operatörü tanımlanırsa, Schrödinger denklemi

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi}$$

olarak da yazılabilir.

Bu dalga denkleminin çözümü olan $\psi(\vec{r},t)$ fonksiyonu, incelenen bir sistem hakkındaki tüm bilgiyi içermektedir.

Şimdi, bu matematiğin fiziksel yorumuna bakalım. Bu aşamada iki soruya cevap vermek gerekir:

1. Parçacığın belli bir t anındaki konumu nedir? Belirsizlik ilkesine göre konumunu zaten kesin olarak bilme olanağımız yoktur, ancak olasılığından bahsedebiliriz. O halde, parçacığın $\vec{r}$ konumlu bir yerde bulunma olasılığını ψ fonksiyonu nasıl verebilir?
2. Schrödinger denkleminin çözümü olarak bulunan her fonksiyon bir parçacığı temsil edebilir mi? ψ nin sağlaması gereken koşullar nelerdir?

3.3 DALGA FONKSİYONUNUN OLASILIK YORUMU

Dalga denkleminin içerdiği sanal i sayısı nedeniyle, dalga fonksiyonu $\psi(\vec{r},t)$ genellikle kompleks bir fonksiyon olacaktır. Kompleks bir fonksiyon kendi başına olasılığın bir ölçüsü olamaz. En doğal olarak, mutlak değerinin karesi $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ düşünülebilir.

Bu amaçla, Schrödinger denkleminin çözümü olan bir ψ' fonksiyonu için mutlak değer karesinin tüm uzaydaki toplamına bakalım (yine tek boyutlu durumu ele alalım, daha sonra üç boyuta genelleştiririz). Bu integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi'|^2 dx = N^2$$

gibi sonlu bir reel N^2 değerine eşit olsun. Bu N^2 sayısına ψ' dalga fonksiyonunun *normu* denir. Buradan giderek

$$\psi(x,t) = \frac{1}{N}\psi'(x,t)$$

gibi yeni bir dalga fonksiyonu tanımlarsak, bu da Schrödinger denkleminin bir çözümü olacaktır (lineer ve homojen bir differansiyel denklemin özelliği). Bu ψ nin normu ise

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1$$

olur (veya, ψ fonksiyonu *normlanmıştır* denir).

Bu özellik $|\psi|^2$ nin olasılık yorumu için yeterlidir. Üç boyutlu duruma genelleştirirsek, *bir parçacığın $\vec{r}$ konumu etrafında küçük bir dV hacım elemanında bulunma olasılığı*

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 dV \tag{3.4}$$

kadardır.

Dalga fonksiyonu normlanmış olduğundan uzaydaki tüm noktalardaki olasılıkları toplamı (integrali)

$$\int_V |\psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1$$

olur. $|\psi(\vec{r},t)|^2$ mutlak değer karesi *olasılık yoğunluğu* adını alır.

3.3.1 HANGİ TÜR FONKSİYONLAR DALGA FONKSİYONU OLABİLİR?

Bir önceki kısımda olasılık yorumunu getirdikten sonra, şimdi bu sorunun cevabını verebiliriz.

- **Norm.** Yukarda hesapladığımız $|\psi'|^2$ nin N^2 normu sonsuz olursa tüm bu olasılık yorumları suya düşer. O halde, *ancak normu sonlu olan ψ fonksiyonları dalga fonksiyonu olarak kabul edilebilirler.*

$$\int |\psi(\vec{r},t)|^2 dV = \text{sonlu} < \infty$$

Bu tür fonksiyonlar için matematikte bir kriter gösterilmiştir: Eğer $\psi(\vec{r},t)$ fonksiyonu uç değerlerde sıfıra gidiyorsa normu sonlu olur:

$$\lim_{r\to\infty} \psi(\vec{r},t) \to 0$$

Bu koşula aykırı olduğu halde kuantum mekaniğinde kullanılan bir dalga fonksiyonu vardır (düzlem dalga). Bu özel durum daha sonraki kısımda incelenecektir.

- **Süreklilik.** Olasılık yorumuna göre parçacığın konumu bir yerden diğerine süreksiz değişemez, aynı anda iki olasılığı olamaz ve bir yerde sonlu olasılıkla bulunabilir. Bunun matematiksel anlamı: $\psi(\vec{r},t)$ *fonksiyonu sürekli, tek değerli ve ıraksak olmayan bir fonksiyon olmalıdır.*

- **Birinci türevin sürekliliği.** Schrödinger denkleminde 2.türevinin davranışını inceleyelim:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m[V(x)-E]}{\hbar^2}\psi(x)$$

Eşitliğin sağ tarafında $V(x)$ fonksiyonunun davranışı sol taraftaki 2.türevi etkileyecektir:

  - Eğer $V(x)$ sürekli ise 2.türev sürekli olur. Dolayısıyla 1.türev de sürekli olacaktır.
  - $V(x)$ süreksiz, ancak sonlu bir sıçrama yapıyorsa, sol taraftaki 2.türev de aynı sonlu süreksizliği gösterir. Matematikten bilindiği üzere, 2.türev sonlu bir süreksizlik gösteriyorsa 1.türev sürekli olur.
  - $V(x)$ sonsuz bir sıçrama yapıyorsa (örneğin, dik bir potansiyel duvarında), sol taraftaki 2.türev de aynı sonsuz süreksizliği gösterir. Bu durumda, 1.türev sonlu bir sıçrama yapar, ama $\psi(x)$ dalga fonksiyonu yine sürekli kalır.

O halde, *dalga fonksiyonu mutlaka sürekli olmalıdır. Fakat, potansiyel süreksiz ise, 1.türev süreksiz olabilir.*

- **Dalga Fonksiyonunun Fazı.** Bir sistemin belirli bir durumunu temsil eden dalga fonksiyonu ψ ise, bunun kompleks bir sabitle çarpımı olan $\psi' = c\psi$ fonksiyonu (örneğin, $i\psi$) farklı bir durumu temsil eder mi? Hayır. Çünkü, fiziksel olarak esas olan $|\psi|^2$ olasılık yoğunluğudur. ψ normlanmışsa, yeni fonksiyonun normlanma koşulu

$$\int_V |\psi'|^2\, dV = 1$$
$$|c|^2 \int_V |\psi|^2\, dV = |c|^2 = 1$$

olmalıdır. Mutlak değer karesi 1 olan her kompleks sayı

$$c = e^{i\alpha} \qquad |c|^2 = e^{-i\alpha}e^{i\alpha} = 1$$

olarak yazılabilir. Buradaki α reel sayısı komplek sayının *fazı* olur. O halde, ψ dalga fonksiyonu yanısıra

$$\psi' = e^{i\alpha}\psi$$

olan her fonksiyon aynı fiziksel durumu temsil eder. Başka bir deyişle, *her dalga fonksiyonu keyfi bir faz faktörü kadar belirsizdir.*

Bu sonuç şöyle de ifade edilebilir: ψ_1 ve ψ_2 gibi iki dalga fonksiyonunun farklı iki durumu temsil edebilmesi için bunlar arasında *lineer bağımlılık* olmamalıdır, yani

$$c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \neq 0 \quad \text{koşulu aranır.}$$

Alıştırma 3.3 : Aşağıda verilen fonksiyonların $[-\infty, +\infty]$ aralığında birer dalga fonksiyonu olup olamıyacağını belirleyin (a reel bir sayıdır).

$$\text{(a)} \qquad \psi(x) = \frac{1}{x-a}$$

$$\text{(b)} \qquad \psi(x) = e^{-3x}\sin kx$$

$$\text{(c)} \qquad \psi(x) = \frac{xe^{-x^2}}{|x|}$$

$$\text{(d)} \qquad \psi(x) = \frac{\cos ax}{x^2}$$

$$\text{(e)} \qquad \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{x^2+a^2}}$$

Çözüm : Dalga fonksiyonunun her yerde sonlu olması koşuluna göre, (a), (b) ve (d) ifadeleri dalga fonksiyonu olamaz (biri $x = a$ da, ikincisi $x = -\infty$ de, diğeri ise $x = 0$ da sonsuzdur). Tek değerli olma koşuluna göre de (c) yi eleyebiliriz, çünkü $x/|x|$ fonksiyonu $x = 0$ da iki değerlidir ($x = 0^-$ için -1, $x = 0^+$ için +1). (e) fonksiyonu heryerde sonlu, tekdeğerli ve süreklidir. Normunu hesaplarsak

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2+a^2} = \left|\frac{1}{a}\tan^{-1}\frac{x}{a}\right|_{-\infty}^{+\infty} = \frac{\pi}{a}$$

Normu sonlu olduğu için dalga fonksiyonu olabilir.

3.3.2 OLASILIK KORUNUMU

Yukarda verdiğimiz yorum belirli bir t anında geçerliydi ve parçacığın uzaydaki bir V hacminde bulunma olasılıkları toplamı 1 oluyordu. Bu yorum zaman değiştikçe tutarlı mıdır? Başka bir deyişle, eğer parçacık kararlı ise (yani, bozunmaya uğramıyorsa), V hacmi içindeki noktalarda bulunma olasılıkları toplamı her t zamanı için hep 1 kalır mı? Bu sorunun cevabını bulmak için

$$\int_V |\psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1$$

normunun t ye göre türevini alalım. Sonuç sıfır oluyorsa, bu norm t ye göre sabit kalacak, yani hep 1 e eşit olacaktır.

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V |\psi(\vec{r},t)|^2 dV = \int_V \frac{\partial}{\partial t}|\psi(x,t)|^2 dV = \int_V \left[\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi + \frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^*\right] dV$$

ifadesini inceleyelim.

Schrödinger denkleminden $\partial\psi/\partial t$ faktörünü çekip alırsak

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi\right]$$

olur. Bu ve kompleks eşleniği

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V^*\psi^*\right]$$

yerlerine konursa, integral içindeki ifade

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(x,t)|^2 = \frac{\hbar}{2im}\left[\psi\nabla^2\psi^* - \psi^*\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(V - V^*)\psi^*\psi\right]$$

olur.

V potansiyeli reel ise ($V^* = V$) son terim sıfır olur. Kalan kısımda

$$f\nabla^2 g = \vec{\nabla}.\left(f\vec{\nabla}g\right) - \left(\vec{\nabla}f\right).\left(\vec{\nabla}g\right)$$

özdeşliği kullanılırsa

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = -\frac{i\hbar}{2m}\vec{\nabla}.\left[\psi\vec{\nabla}\psi^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi\right]$$

ve

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 dV = -\frac{i\hbar}{2m}\int_V \vec{\nabla}.\left[\psi\vec{\nabla}\psi^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi\right]dV$$

olur. Matematikte *diverjans teoremi* diye bilinen bir sonuca göre, bir fonksiyonun diverjansının hacım integrali yerine bu hacmi saran yüzey üzerinde fonksiyonun kendisinin integrali alınabilir. Buna göre:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 dV = -\frac{i\hbar}{2m}\int_S \left[\psi\vec{\nabla}\psi^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi\right].d\vec{S}$$

yazılabilir. Buradaki S yüzeyi tüm V uzayını çevrelediği için, bu yüzeyin her noktası sonsuzda olur ve integral içindeki ψ ve ψ^* dalga fonksiyonları sıfıra giderler (uç değerlerde sıfır olma koşulu). Sonuç olarak ikinci integral sıfır olur ve

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V |\psi|^2 dV = 0$$

bulunur. Bu sonuca göre, $t = 0$ anında normlanmış bir dalga fonksiyonu hep normlu kalacak demektir. Yani, olasılık yorumu zaman içinde de tutarlıdır.

Burada *olasılık yoğunluğu* ρ ve *olasılık akım yoğunluğu* $\vec{j}$ gibi iki büyüklük

$$\rho = |\psi|^2$$
$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\vec{\nabla}\psi^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi\right)$$

tanımlanırsa,

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = -\frac{i\hbar}{2m}\vec{\nabla}.\left[\psi\vec{\nabla}\psi^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi\right] = -\vec{\nabla}.\vec{j}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}.\vec{j} = 0$$

yazılabilir. Bu yapı, klasik elektrodinamikte *yük korunumu*, akışkanlar mekaniğinde *süreklilik denklemi* adı altında karşımıza çıkar. Kuantum Mekaniğinde *olasılık korunumu* adı verilen bu denkleme göre, bir dV hacım elemanı içinde olasılık artması(azalması) oluyorsa $(\partial\rho/\partial t)$, bu hacımdan içeri (dışarı) bir olasılık akımı $(\vec{j})$ olması gerekir.

3.4 BEKLENEN DEĞERLER

Bir deneyde, x-ekseni doğrultusunda herbirinin dalga fonksiyonu aynı olan çok sayıda parçacık üretildiğini varsayalım. Bu parçacıkların herbirinin konumunu ölçmek üzere çok sayıda gözlem yapalım. Dalga fonksiyonu $\psi(x,t)$ aynı olduğu halde, her gözlemde bulunan x konumu farklı olacaktır. Yani, tek bir gözlemin sonucunu bilemeyiz.

Ancak, x konumu için bulunan değerlerin aritmetik ortalaması veya *beklenen değeri* olan $< x >$ yi hesaplamak istersek kuantum mekaniği buna cevap verebilir. Bunun için herbir konum değerini, bu konum etrafında dx aralığında bulunma olasılığı $|\psi(x,t)|^2 dx$ ile çarpıp tüm uzayda toplamak yeterlidir:

$$< x >= \int_{-\infty}^{+\infty} x\,|\psi(x,t)|^2\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* x \psi\,dx \tag{3.5}$$

$\psi(x,t)$ zamana bağımlı olduğu için konumun beklenen değeri de zamanla değişecektir.

Genel olarak, $\vec{r}$ konum vektörünün fonksiyonu olan bir $f(\vec{r})$ fiziksel büyüklüğünün beklenen değeri

$$< f >= \int_V \psi^* f(\vec{r})\ \psi\ dV \tag{3.6}$$

ifadesiyle bulunur.

Bu beklenen değer etrafındaki *belirsizlik*, yani olasılık hesabında tanımlanan standard sapma, kuantum mekaniğinde x konumu için

$$\Delta x = \sqrt{< x^2 > - < x >^2} \tag{3.7}$$

olarak tanımlanır.

Momentumun beklenen değerini bulmak üzere

$$< p >= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)\ p\ \psi(x,t)dx$$

ifadesine bakalım. Klasik mekanikte p değişkenini x ve t nin bir fonksiyonu olarak yazıp bu integrali alabilirdik. Fakat kuantum mekaniğinde, belirsizlik ilkesi bize p yi x in fonksiyonu olarak yazamıyacağımızı, çünkü ikisinin birden aynı kesinlikle bilinemiyeceğini söylemektedir.

p değişkenini x in fonksiyonu olarak yazamayız ama, operatörü olarak yazabiliriz. Dalga fonksiyonuna etkisi açısından p nin $-i\hbar\partial/\partial x$ operatörüne eşdeğer olduğu görülmüştü. Bu özellik burada kullanılırsa

$$\begin{aligned} <p> &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)\, p\, \psi(x,t)\, dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)\, (-i\hbar)\, \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x}\, dx \end{aligned}$$

olur. 3 boyutlu uzayda genelleştirirsek, $\vec{p}$ momentum vektörüne gradyan operatörü $-i\hbar\vec{\nabla}$ karşılık gelir:

$$<\vec{p}> = \int_V \psi^*(\vec{r},t)\, (-i\hbar\vec{\nabla})\, \psi(\vec{r},t)\, d^3r$$

Diğer fiziksel büyüklükler için bu sonuç genelleştirilir: $\vec{r}$ ve $\vec{p}$ nin fonksiyonu olan bir $A(\vec{r},\vec{p},t)$ fiziksel büyüklüğünün beklenen değeri

$$<A>= \int_V \psi^*(\vec{r},t)\, \hat{A}(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla}, t)\, \psi(\vec{r},t)\, dV \qquad (3.8)$$

olur. Burada dikkat edilmesi gereken kural şudur: $\partial/\partial x$ veya $\vec{\nabla}$ operatörleri sadece sağında bulunan dalga fonksiyonuna etki ederler.

Alıştırma 3.4: *Bir parçacığın dalga fonksiyonu*

$$\psi(x) = e^{-|x|} \sin ax$$

olarak veriliyor. (a) Bu dalga fonksiyonunu normlayın. (b) Parçacığın konumunun $x = 1$ *den daha ötede bulunma olasılığını hesaplayın.*

Çözüm: (a) $|x|$ mutlak değeri $[-\infty, 0]$ aralığında $-x$, ve $[0, +\infty]$ aralığında x olarak yazılabilir. Buna göre

$$N^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\, dx$$

hesaplanırsa

$$\begin{aligned} N^2 &= \int_{-\infty}^{0} |e^x \sin ax|^2\, dx + \int_0^{\infty} |e^{-x} \sin ax|^2\, dx \\ &= 2\int_0^{\infty} |e^{-x} \sin ax|^2\, dx = \frac{a^2}{2(1+a^2)} \end{aligned}$$

olur. O halde, normlanmış dalga fonksiyonu

$$\psi(x) = \frac{1}{N} e^{-|x|} \sin ax = \sqrt{\frac{2(1+a^2)}{a^2}}\, e^{-|x|} \sin ax \quad \text{olur.}$$

(b) Parçacığın $[1,+\infty]$ aralığında bulunma olasılıklarının toplamı (yani integrali) hesaplanmalıdır.

$$\int_1^\infty |\psi|^2\,dx = \frac{2(1+a^2)}{a^2}\int_1^\infty e^{-2x}\sin^2 ax\,dx = \frac{e^{-2}}{2a^2}[1+a^2\cos 2a + a\sin 2a]$$

olur.

Alıştırma 3.5 : $[-a,+a]$ aralığında tanımlanan bir dalga fonksiyonu

$$\psi(x) = (a^2 - x^2)$$

olarak veriliyor. (a) Bu dalga fonksiyonunu normlayın. (b) Parçacığın $[0,a/2]$ aralığında bulunma olasılığını hesaplayın. (c) Konum, momentum ve kinetik enerjinin beklenen değerlerini bulun. (d) $\Delta x \Delta p$ belirsizlik çarpımını hesaplayın.

Çözüm : (a) Mutlak değer karesinin $[-a,+a]$ aralığında integrali

$$N^2 = \int_{-a}^{+a} dx\,(a^2-x^2)^2 = 2\int_0^a dx\,(a^2-x^2)^2 = \frac{16a^5}{15}$$

bulunur (ψ ve $|\psi|^2$ çift fonksiyondurlar). Buna göre, normlanmış dalga fonksiyonu

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{15}{16a^5}}(a^2-x^2)$$

olur.

(b) Parçacığın $[0,a/2]$ aralığında bulunma olasılığı, $|\psi|^2$ olasılık yoğunluğunun bu aralıktaki integrali ile hesaplanır:

$$\int_0^{a/2} dx\,|\psi(x)|^2 = \frac{15}{16a^5}\int_0^{a/2} dx\,(a^2-x^2)^2 = \frac{203}{512} \approx 0.40$$

(c) x, $p = -i\hbar\, d/dx$ ve $K.E. = p^2/2m = -\hbar^2/2m\; d^2/dx^2$ operatörlerinin beklenen değerleri

$$\begin{aligned}
<x> &= \frac{15}{16a^5}\int_{-a}^{a} dx\,x\,(a^2-x^2)^2 = 0 \qquad \text{(tek fonksiyon)} \\
<p> &= \frac{-15i\hbar}{16a^5}\int_{-a}^{a} dx\,(a^2-x^2)\frac{d}{dx}(a^2-x^2) = \frac{30i\hbar}{16a^5}\int_{-a}^{a} dx\,(a^2-x^2)\,x = 0 \\
<K.E.> &= \frac{15}{16a^5}\int_{-a}^{a} dx\,(a^2-x^2)\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)(a^2-x^2) = \frac{15\hbar^2}{16ma^5}\int_{-a}^{a} dx\,(a^2-x^2) \\
<K.E.> &= \frac{<p^2>}{2m} = \frac{5}{4}\frac{\hbar^2}{ma^2}
\end{aligned}$$

(d) Belirsizliklerin standard sapma tanımları

$$\Delta x = \sqrt{<x^2> - <x>^2} \qquad \Delta p = \sqrt{<p^2> - <p>^2}$$

olur. (c) şıkkındaki sonuçları burada kullanırız:

$$< x >=< p >= 0 \qquad < p^2 >= \frac{5}{2}\frac{\hbar^2}{a^2}$$

Buna göre, sadece $< x^2 >$ beklenen değerini hesaplamak yeterlidir:

$$< x^2 >= \frac{15}{16a^5}\int_{-a}^{a} dx\, x^2(a^2 - x^2)^2 = \frac{a^2}{7}$$

değeri de kullanılırsa

$$\Delta x = \frac{a}{\sqrt{7}}\,, \quad \Delta p = \sqrt{\frac{5}{2}}\frac{\hbar}{a}\,, \quad \Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{5}{14}}\hbar \approx 0.6\,\hbar \quad \text{bulunur.}$$

3.5 MOMENTUM UZAYI

Tek boyutta dalga fonksiyonu $\psi(x,t)$ nin ters Fourier transformu olan $\phi(p)$ genlik dağılım fonksiyonunu gözönüne alalım:

$$\phi(p) = \int dx\, \psi(x,t)\, \mathrm{e}^{-i(px-Et)/\hbar}$$

Bu fonksiyonun da ψ ye benzer özellikleri vardır:

- Eğer ψ normlanmışsa ϕ de normlanmış bir fonksiyondur. Bunu görmek üzere $|\phi(p)|^2$ nin integralini alalım (hesabı $t = 0$ da yapmak yeterlidir):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(p)\,\phi(p)\,\frac{dp}{2\pi\hbar} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(p)\left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi(x)\,\mathrm{e}^{-ipx/\hbar}\right]\frac{dp}{2\pi\hbar}$$

Sınırlar sonsuzda olduğundan bu iki integralin sırası değişebilir:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi(x)\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(p)\,\mathrm{e}^{-ipx/\hbar}\frac{dp}{2\pi\hbar}\right]$$

Parantez içindeki ifade ψ^* ın Fourier transformudur. Sonuç olarak

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(p)|^2\,\frac{dp}{2\pi\hbar} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\,dx = 1 \qquad \textit{(Parseval eşitliği)} \tag{3.9}$$

bulunur. O halde, ψ normlanmışsa ϕ de normlanmıştır.

- Momentumun beklenen değeri ifadesine tekrar bakalım:

$$< p >= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\,(-i\hbar)\,\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\,dx$$

Bu ifadeyi değişik yazmak üzere integral içindeki ψ nin Fourier transformunu kullanalım:

$$< p >= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\left[\int_{-\infty}^{\infty} \phi(p)\, e^{ipx/\hbar}\frac{dp}{2\pi\hbar}\right] dx$$

kısmi türev sadece üstel fonksiyona etki eder ve $\partial(e^{ipx})/\partial x = (ip/\hbar)e^{ipx/\hbar}$ olur:

$$\begin{aligned} < p > &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\left[\int_{-\infty}^{\infty} p\,\phi(p) e^{ipx/\hbar}\frac{dp}{2\pi\hbar}\right] dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, e^{ipx/\hbar} dx\right] p\,\phi(p)\frac{dp}{2\pi\hbar} \end{aligned}$$

parantez içindeki ifade ψ^* ın ters Fourier transformu ϕ^* olacağından

$$< p >= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar}\phi^*(p)\, p\,\phi(p)$$

bulunur. Bu ifade, $< x >$ için bulunan ifadeyle karşılaştırıldığında, x ve $\psi(x)$ yerine p ve $\phi(p)$ kullanılmakla beraber tıpatıp aynı olduğu görülmektedir.

- Şimdi $\hat{x}$ konum operatörünün beklenen değerine bakalım:

$$< x >= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\, x\,\psi(x)\, dx$$

Bu kez integral içinde ψ^* nin Fourier transformunu kullanalım:

$$< x >= \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) e^{-ipx/\hbar}\frac{dp}{2\pi\hbar}\right] x\,\psi(x)\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dp}{2\pi\hbar}\phi^*(p)\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-ipx/\hbar}\psi(x)\, dx$$

Yine $xe^{-ipx/\hbar}$ çarpımını bir kısmi türev şeklinde yazalım:

$$x e^{-ipx/\hbar} = \left(\frac{\hbar}{-i}\right)\frac{\partial}{\partial p} e^{-ipx/\hbar} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p} e^{-ipx/\hbar}$$

Bu kısmi türev p ye göre alındığından, x-integrali dışına alınabilir:

$$< x >= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dp}{2\pi\hbar}\phi^*(p)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar}\psi(x)\, dx\right]$$

Köşeli parantez içindeki ifade $\phi(p)$ olur:

$$< x >= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dp}{2\pi\hbar}\phi^*(p)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\phi(p)$$

Bu ifadeye göre, $\phi(p)$ fonksiyonları ile çalışıyorsak, x konumu yerine $i\hbar\partial/\partial p$ operatörü alındığında, aynı beklenen değer elde edilecektir.

Bu sonuçlar $\psi(x)$ in temsil ettiği fiziksel durumun $\phi(p)$ ile de temsil edilebileceğini gösterir. Başka bir deyişle, $\phi(p)$ *aynı sistemin momentum uzayındaki dalga fonksiyonudur.* Fakat, konum ve momentum operatörleri her iki uzayda farklı olacaktır: x-uzayında bu iki operatör $\{x, -i\hbar\partial/\partial x\}$, p-uzayında ise $\{i\hbar\partial/\partial p, p\}$ olurlar. Bir fiziksel büyüklük,

örneğin $A(p)$ şeklinde sadece momentumun fonksiyonu ise, bunun beklenen değerini x uzayında $-i\hbar\partial/\partial x$ operatörüyle hesaplamak yerine, momentum uzayında doğrudan hesaplamak daha kolaylık sağlar.

Alıştırma 3.6 : Gauss dalga fonksiyonu

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + \frac{ip_0x}{\hbar}}$$

olarak veriliyor (buradaki x_0, p_0 ve σ reel sabitlerdir).
(a) Dalga fonksiyonunu normlayın. (b) Momentum uzayındaki $\phi(p)$ dalga fonksiyonunu bulun. (c) $\Delta x\Delta p$ belirsizlik çarpanını hesaplayın.

Çözüm : Önemli bir uygulama olan Gauss dalga fonksiyonunun ilginç özellikleri vardır. Bunları ayrıntılı olarak inceleyelim.

(a) Olasılık yoğunluğu $|\psi|^2$ nin integrali hesaplanırsa

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx\psi^*\psi &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2}\, dx\,, \qquad \left(u = \frac{x-x_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-u^2}\, \sqrt{2}\sigma\, du = \sqrt{2\pi}\,\sigma\end{aligned}$$

bulunur. Buradaki integralin değeri

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-au^2} du = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

dir. O halde normlanmış dalga fonksiyonu

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\, \mathrm{e}^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + \frac{ip_0x}{\hbar}}$$

(b) Fourier tranformunu hesaplayalım:

$$\begin{aligned}\phi(p) &= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-(x-x_0)^2/4\sigma^2 + ip_0x/\hbar}\, \mathrm{e}^{-ipx/\hbar}\, dx \\ &= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\left[(x-x_0)^2/4\sigma^2 + i(p-p_0)x/\hbar\right]}\, dx\end{aligned}$$

ifadesinde üstel fonksiyonun argümanını tam kare yapmak üzere

$$\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + i\frac{(p-p_0)}{\hbar}x = \left[\left(\frac{x-x_0}{2\sigma}\right) + \frac{i(p-p_0)\sigma}{\hbar}\right]^2 + \frac{i(p-p_0)x_0}{\hbar} + \frac{\sigma^2(p-p_0)^2}{\hbar^2}$$

yazılır ve yine köşeli parantez içindeki ifade u değişkeni olarak seçilirse

$$\phi(p) = \frac{2\sigma}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \mathrm{e}^{-\sigma^2(p-p_0)^2/\hbar^2 - i(p-p_0)x_0/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-u^2} du$$

$$\phi(p) = (8\pi\sigma^2)^{1/4}\, \mathrm{e}^{-\frac{i(p-p_0)x_0}{\hbar}}\, \mathrm{e}^{-\frac{\sigma^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2}$$

bulunur. Demek ki momentum uzayındaki temsili $\phi(p)$ yine bir Gauss fonksiyonudur.

(c) $\psi(x)$ dalga fonksiyonu kullanarak $< x >$ ve $< x^2 >$ hesaplanırsa (yine üstel fonksiyonda tam kare oluşturup integraller hesaplanır)

$$< x >= x_0 , \qquad \text{ve} \qquad < x^2 >= x_0^2 + \sigma^2 \qquad \text{olur.}$$

Momentum uzayında $\phi(p)$ kullanarak hesaplar yapılırsa bu kez

$$< p >= p_0 , \qquad < p^2 >= p_0^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$$

$$\text{ve} \qquad \Delta x \Delta p = \hbar/2$$

bulunur. Bu sonuçlara göre şu yargılara varabiliriz:

- Belirsizlikler çarpımının $\hbar/2$ ye eşit veya daha büyük olacağını biliyoruz. Gauss dalga fonksiyonu için bu çarpımın minimum $\hbar/2$ değerine eşit olduğu anlaşılır. Bu minimum belirsizlik çarpımı sadece Gauss dalga fonksiyonu için gerçekleşir; bu nedenle Gauss dalga fonksiyonu *minimum dalga paketi* olarak da bilinir.
- Bu sonuçların ışığında, verilen bir Gauss fonksiyonunun yapısına bakarak birçok beklenen değeri tahmin edebiliriz: Yukardaki Gauss fonksiyonu ifadesinde x_0, p_0 ve σ sabitleri sırasıyla konumun ve momentumun beklenen değerleri ile konumdaki standard sapmayı gösterirler.

3.6 ZAMANDAN BAĞIMSIZ SCHRÖDİNGER DENKLEMİ

Schrödinger denklemindeki $V(\vec{r},t)$ potansiyeli bir çok fiziksel sistemde t zamanından bağımsızdır. Böyle durumlarda Schrödinger denklemi,

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\,\psi(\vec{r},t)$$

kısmi diferansiyel denklemlerin bilinen *değişken ayrımı* yöntemiyle çözülebilir. Bunun için

$$\psi(\vec{r},t) = f(t)\;\psi(\vec{r})$$

şeklinde, t ve $\vec{r}$ ye bağımlı bir çözüm aranır. (Burada $\psi(\vec{r},t)$ ile $\psi(\vec{r})$ farklı şeylerdir, fakat bu yazılış çok yaygın olduğu için burada da kullanacağız). Buna göre,

$$\frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{df}{dt}\,\psi(\vec{r})$$
$$\nabla^2\psi(\vec{r},t) = f\,\nabla^2\psi(\vec{r})$$

değerleri Schrödinger denkleminde yerine konup, eşitliğin her iki tarafı $f(t)\psi(\vec{r})$ ile bölünürse

$$i\hbar\frac{1}{f}\frac{df}{dt} = \frac{1}{\psi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\,\psi(\vec{r})\right]$$

olur. Bu eşitliğin sol tarafı sadece t değişkenine, sağ tarafı ise sadece $\vec{r}$ değişkenine bağlıdır. Bu eşitliği, her t ve her $\vec{r}$ değeri için sağlayabilmenin tek yolu, iki tarafın da aynı bir sabite eşit olmasıdır. Bu sabite E dersek

$$i\hbar\frac{1}{f}\frac{df}{dt} = E$$

$$\frac{1}{\psi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r})\right] = E$$

gibi iki adi diferansiyel denklem bulunur. Birinci denklemin çözümü

$$f(t) = \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}$$

olur. Diğer denklem ise

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\,\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r})} \tag{3.10}$$

olur ki bunun çözümü için $V(\vec{r})$ potansiyelinin verilmiş olması gerekir. Buna *zamandan bağımsız Schrödinger denklemi* denir. Eğer $\psi(\vec{r})$ bulunursa, komple çözüm

$$\psi(\vec{r},t) = \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\,\psi(\vec{r}) \tag{3.11}$$

olacaktır.

E sabitinin enerji boyutuna sahip olduğu kolayca görülebilir. Ayrıca, E kompleks değerler alamaz. Çünkü, kompleks bir E sabitini $E = E_r + iE_i$ şeklinde yazarsak, komple çözümdeki üstel faktör

$$\mathrm{e}^{-iEt/\hbar} = \mathrm{e}^{-i(E_r+iE_i)} = \mathrm{e}^{-iE_rt/\hbar}\,\mathrm{e}^{E_it/\hbar}$$

şeklinde, $t \to \pm\infty$ değerlerinden birinde mutlaka sonsuza gidecektir, dalga fonksiyonu olarak kabul edilemez.

Niçin bu tür çözümler önemlidir? Olasılık yoğunluğu ifadesinde bu çözümü kullanırsak

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = \psi^*(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t) = \mathrm{e}^{+iEt/\hbar}\,\psi^*(\vec{r})\,\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\,\psi(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$$

olduğu görülür, yani *olasılık dağılımı zamandan bağımsızdır!* Bu durumda, hesaplanan tüm beklenen değerler zamandan bağımsız olacaktır. Daha başka bir deyişle, sistemin fiziksel özellikleri zamanla değişmeyecek, *kararlı* olacaktır. Bu nedenle $\psi(\vec{r},t) = \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\,\psi(\vec{r})$ yapısındaki dalga fonksiyonları *kararlı durum* temsil ediyor denir.

Öte yandan, zamandan bağımsız denklemin sol tarafının $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$ hamiltonyen operatörü olduğu gözönüne alınırsa

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

yazılabilir. Eşitliğin sol tarafında bir operatör ($\hat{H}$), sağ tarafında bir reel sayı (E) yer almaktadır. Lineer cebirde matrisler için bilinen

$$\hat{A}u = \lambda u$$

özdeğer denklemi yapısı hatırlanırsa ($\hat{A}$ bir matris, u özdeğer vektörü, λ ise özdeğerdir), Schrödinger denklemine bir özdeğer denklemi gözüyle bakılabilir. Hamiltonyen operatörünün E özdeğerlerine karşılık gelen özfonksiyonları $\psi(\vec{r})$ olur.

Bu aşamada şöyle bir soru sorulabilir "Keyfi her E değeri için Schrödinger denkleminin çözümü var mıdır?" Bu sorunun cevabı, 4.bölümden itibaren değişik fiziksel sistemler incelendiğinde görülecektir ki ancak belirli E enerjileri için çözümler vardır. Enerji kuantalanması da böylece sağlam bir temele oturmuş olur.

3.7 SERBEST PARÇACIK: DÜZLEM DALGA ÇÖZÜMÜ

Tek boyutlu uzayda, potansiyeli sıfır olan bir parçacığı incelemek üzere, zamandan bağımsız Schrödinger denkleminde $V = 0$ yapalım:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\ \psi(x)$$

diferansiyel denkleminin çözümü sinüs veya kosinüs cisinden yazılabilirse de, kompleks üstel ifade kullanarak

$$\psi(x) = A\,e^{\pm ikx} \qquad (k = \sqrt{2mE}/\hbar)$$

yazılabilir. (Buradaki A normlama sabiti bir sorun oluşturur ama bunu daha sonra inceleyeceğiz.) Komple çözüm ise

$$\psi(x,t) = A\,e^{-iEt/\hbar}e^{\pm ikx} = A\,e^{i(\pm kx-\omega t)} = A\,e^{ik(\pm x-vt)}$$

olur (burada $E = \hbar\omega$ ve $v = \omega/k$ bağıntıları kullanıldı). İkinci dereceden diferansiyel denklem olduğu için $\pm x$ yönlerinde ilerleyen iki çözüm bulmuş oluruz.

Görüldüğü gibi çözümün fiziksel yorumu basittir ($t = 0$ alalım): Serbest parçacığın Fourier serisi açılımı sadece $e^{\pm ikx}$ gibi tek bir k dalgasayılı düzlem dalga bileşeninden oluşmaktadır. Yani, parçacığın momentumu kesinlikle belli olup $p = \hbar k = \sqrt{2mE}$ değerine eşittir. Parçacığın konumunu bulmak üzere, olasılık yoğunluğuna bakarsak

$$|\psi(x)|^2 = A^*\psi^*(x)\,A\psi(x) = |A|^2e^{-ikx}e^{ikx} = |A|^2 = \text{sabit}$$

olduğu görülür, yani uzayda her yerde aynı olasılıkla bulunabilir. *Serbest parçacığın momentumu kesinlikle belli, konumu ise tamamen belirsizdir.*

Momentum p ve dolayısıyla $E = p^2/2m$ enerjisinin alabileceği değerler konusunda hiçbir kayıt olmadığından, serbest parçacık $E > 0$ olan her değeri alabilir, yani enerji spektrumu süreklidir.

3.7.1 DÜZLEM DALGALARIN NORMLANMASI

Oldukça sık kullanılan $\psi(x) = Ae^{ikx}$ düzlem dalga fonksiyonunu normlamak üzere

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx$$

yapan A katsayısını arayalım:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 e^{-ikx} e^{ikx} dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} 1\, dx = \infty$$

Bu sonuca göre, düzlem dalga normu sonsuz, yani normlanamayan bir fonksiyondur. Bu özelliği fiziksel açıdan kabul etmemek gerekirdi. Ancak kuantum mekaniğinde, özellikle dalga paketinin bileşenleri olarak hep düzlem dalgalar kullanılır.

Bu sorun *kutu normlaması* denilen bir teknikle çözülür: Gerçekte hiçbir fiziksel sistemin boyutları sonsuz değildir. Bir laboratuardaki elektron için deney sınırlarının hemen ötesindeki duvarlar sonsuz sayılabilir. O halde, ele alınan sistemi ve onu inceleyen aygıtı, kenar uzunluğu L olan küp şeklinde bir kutu içinde hapsedilmiş varsayalım (tek boyutta $[0, L]$ aralığı). Böyle bir uzayda düzlem dalganın normu

$$\int_0^L |e^{ikx}|^2 dx = \int_0^L 1\, dx = L$$

olacaktır ve normlanmış düzlem dalga

$$\psi(x) = \frac{1}{L^{1/2}} e^{ikx}$$

olarak yazılabilir. Üç boyutlu V hacmında ise

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{V^{1/2}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}$$

olduğu kolayca çıkarılabilir. Bu dalga fonksiyonu hesaplarda kullanılıp sonuçlar elde edildikten sonra $L \to \infty$ limitine gidilirse, sonuçların L den bağımsız olduğu görülür.

Düzlem dalganın momentum uzayındaki dalga fonksiyonu ne olur? Bunu görmek için momentumu p_0 (dalga sayısı k_0) olan tek boyutlu düzlem dalga

$$\psi(x) = e^{ik_0 x}$$

nın ters Fourier dönüşümü alınırsa

$$\phi(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi(x) e^{-ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{ik_0 x} e^{-ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{i(k_0 - k)x}$$

olur. Bu integral, *Dirac delta fonksiyonu* denilen özel bir "fonksiyon"u belirler. Bunu ayrıntılı olarak inceleyelim.

3.8 DİRAC DELTA FONKSİYONU

Kuantum mekaniğinde sık gerek duyulan bu fonksiyon, δ_{ij} Kronecker deltasının sürekli bir değişken için genellemesi olarak görülebilir.

Dirac delta fonksiyonu, bir integral içinde yaptığı işle tanımlanır. $[-\infty,\infty]$ aralığında herhangi bir $f(x)$ fonksiyonu ve bu aralıkta a reel bir sabit olmak üzere

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, f(x)\, \delta(x-a) = f(a)} \tag{3.12}$$

eşitliği δ Dirac delta fonksiyonunun tanımıdır. Yani, $f(x)$ fonksiyonunun genel davranışı ne olursa olsun, $\delta(x-a)$ ile integrali onun $x=a$ daki değerini verir.

Diğer bir tanım da

$$\delta(x-a) = \begin{cases} 0 & x \neq a \text{ ise} \\ +\infty & x = a \text{ ise} \end{cases}$$

şeklindedir. Gerçekte bu özelliklere sahip hiçbir fonksiyon yoktur. Burada amaç, yukardaki integralde yaptığı görevi tanımlamaktır. Bir fonksiyon ifadesi olarak, ancak bilinen bazı fonksiyonların limiti olarak düşünülebilir.

δ-fonksiyonu için kullanılan bazı limit ifadeler şunlardır:

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} \\ &= \lim_{g\to\infty} \frac{\sin gx}{x} \\ &= \lim_{g\to\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2(gx)}{gx^2} \end{aligned}$$

Tüm bu ifadelerin geçerli olup olmadığı, bir $f(x)$ fonksiyonu ile integrali alınarak görülür: Sonuç $f(0)$ oluyorsa, o ifade δ-fonksiyonunu temsil ediyor demektir.

Dirac δ-fonksiyonunun özellikleri:

$$\begin{aligned} \delta(-x) &= \delta(x) && \text{(çift fonksiyon)} \\ \delta(bx) &= \frac{1}{|b|}\,\delta(x) \\ \delta(x^2-a^2) &= \frac{1}{2a}[\delta(x-a)+\delta(x+a)] \\ x\,\delta'(x) &= -\delta(x) \end{aligned}$$

Bu özelliklerden ikincisini ispat edelim: Dirac delta fonksiyonu tanımını $a=0$ için yazalım:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, f(x)\, \delta(x) = f(0)$$

bu ifadede $x = by$ şeklinde bir y değişkenine geçilirse ($dx = |b|dy$, mutlak değer alınır, integral sınırlarını değiştirmeye gerek kalmaz.)

$$|b| \int_{-\infty}^{+\infty} dy\, f(by)\, \delta(by) = f(0)$$

olur. Öte yandan aynı sonucu doğrudan tanımdan giderek

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy\, f(by)\, \delta(y-0) = f(0)$$

şeklinde yazabiliriz. Bu iki ifadenin sol tara arı karşılaştırıldığında aradığımız özellik bulunur.

Fourier dönüşümü alındığında da Dirac δ-fonksiyonu için çok kullanışlı bir ifade elde edilir. Bunu görmek için bir $f(x)$ fonksiyonunun dönüşümü

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, g(k) \mathrm{e}^{ikx}$$

ve onun $k = k_0$ değerindeki ters dönüşümüne bakalım:

$$g(k_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x)\, \mathrm{e}^{-ik_0 x}$$

Bu ifade içinde $f(x)$ transformu kullanalım:

$$g(k_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \mathrm{e}^{-ik_0 x} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, g(k)\, \mathrm{e}^{ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, g(k) \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \mathrm{e}^{i(k-k_0)x} \right]$$

Bunun yine $g(k_0)$ ya eşit olması için parantez içindeki kısım delta fonksiyonu olmalıdır:

$$\boxed{\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \mathrm{e}^{i(k-k_0)x} = \delta(k-k_0)} \qquad (3.13$$

Bu ifade 3 boyutlu uzayda genelleştirilebilir:

$$\delta^3(\vec{k}) \equiv \delta(k_x)\, \delta(k_y)\, \delta(k_z) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint dx\, dy\, dz\, \mathrm{e}^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \qquad (3.14$$

Burada tekrar düzlem dalgaya dönersek, bir önceki kısımda aradığımız

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{ik_0 x}$$

düzlem dalgasının momentum uzayındaki temsili

$$\phi(k) = 2\pi\, \delta(k-k_0) \qquad (3.15$$

Dirac delta fonksiyonudur. Serbest parçacığın momentum dağılımının k_0 değerinde pik olduğu, diğer k değerlerinde sıfır olduğu böyle ifade edilebilir.

PROBLEMLER

3.1 *$[-a,+a]$ aralığında*

$$\psi(x) = A\left(\cos\frac{\pi x}{a} + 1\right)$$

dalga fonksiyonu veriliyor. (a) Bu fonksiyonu normlayın. (b) Δx ve Δp belirsizliklerini hesaplayın.

3.2 *Tek boyutlu uzayda bir parçacığın dalga fonksiyonu*

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{x^2+a^2}}\, e^{ip_0 x/\hbar}$$

olarak veriliyor (A, a ve p_0 reel sabitlerdir.) (a) Dalga fonksiyonunu normlayan A sabitini bulun. (b) Parçacığın x konumu ölçüldüğünde $[-a/\sqrt{3}, +a/\sqrt{3}]$ aralığında bulunma olasılığı nedir? (c) Momentumun beklenen değerini hesaplayın.

3.3 *Tek boyutta bir dalga fonksiyonunun*

$$< xp > + < px > = m\frac{d}{dt} < x^2 >$$

bağıntısını sağladığını gösterin (bu sonuç üç boyutta da geçerlidir).

3.4 *Bir parçacığın momentum dağılım fonksiyonu*

$$\phi(p) = \sqrt{\frac{2\pi a}{\hbar}}\, e^{-\frac{a}{\hbar}|p|}$$

olarak veriliyor. (a) Dalga fonksiyonunun

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{a}{2\pi}}\,\frac{2a}{x^2+a^2}$$

olduğunu gösterin. (b) Momentum ve enerjinin beklenen değerlerini bulun (bu iki fonksiyonun da çift fonksiyon olduğunu gözönüne alın).

3.5 *Tek boyutlu uzayda bir potansiyel periyodik ise, yani sabit bir a için $V(x+a) = V(x)$ ise, (a) Schrödinger denkleminin çözümlerinin $\psi(x+a) = \lambda\psi(x)$ özelliğine sahip olacağını gösterin. (b) Bu çözümler $\psi(x) = e^{ikx}u_k(x)$ şeklinde yazılırsa (k reel), u_k fonksiyonlarının da periyodik, yani $u_k(x+a) = u_k(x)$ olduğunu gösterin.*

3.6 *Dirac delta fonksiyonu için aşağıda verilen bağıntıların geçerli olduğunu gösterin:*

(a) $x\delta'(x) = -\delta(x)$, (b) $\delta(\sqrt{x}) = 0$, (c) $\delta(x-a)\,\delta(x-b) = \delta(a-b)$

3.7 *$\hat{A}$, $\hat{B}$ ve $\hat{C}$ operatörleri için aşağıdaki bağıntıların doğruluğunu gösterin:*

(a) $[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}] = [\hat{A},\hat{C}] + [\hat{B},\hat{C}]$

(b) $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = \hat{A}[\hat{B},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{C}]\hat{B}$

3.8 Yerdeğiştirme operatörü $\hat{D}_a$

$$\hat{D}_a\psi(x) = \psi(x+a)$$

olarak tanımlanır. Bu operatörün $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$ *momentum operatörü cinsinden*

$$\hat{D}_a = e^{ia\hat{p}/\hbar}$$

olarak yazılabileceğini gösterin ($\psi(x+a)$ *nın Taylor açılımını gözönüne alın).*

3.9 *Harmonik salınıcı hamiltonyeni* $\hat{H} = p^2/2m + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ *için,* $\hat{x}$ *ve* $\hat{p} = i\hbar d/dx$ *operatörleri cinsinden iki yeni operatör tanımlanıyor:*

$$\hat{a} = \frac{\beta}{\sqrt{2}}\left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right) \quad \text{ve} \quad \hat{a}^\dagger = \frac{\beta}{\sqrt{2}}\left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right); \qquad (\beta = \sqrt{m\omega/\hbar})$$

(a) $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ *olduğunu gösterin.*

(b) Harmonik salınıcı hamiltonyeninin bu operatörler cinsinden

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})$$

olarak yazılabileceğini gösterin.

3.10 *Zamandan bağımsız Schrödinger denkleminde* $V(x)$ *potansiyeline sabit bir* V_0 *potansiyeli ilave edildiğinde (a) Dalga fonksiyonunun değişmeyeceğini (b) Toplam enerjinin* V_0 *kadar artacağını gösterin.*

3.11 Ehrenfest Teoremleri. $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2 + V(x)$ *hamiltonyen operatörü için*

(a) $[\hat{H}, x] = -i\hbar p/m$

(b) $[\hat{H}, p] = i\hbar\, dV/dx$ *olduğunu gösterin.*

(c) Bu iki bağıntıyı kullanarak

$$< p > = m\frac{d < x >}{dt}, \qquad \text{ve} \qquad \frac{d < p >}{dt} = -\left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle$$

olduğunu gösterin (Bu sonuçlardan birincisi parçacığın klasik momentum tanımı $p = mv$*, ikincisi ise,* $F = -dV/dx$ *olduğu düşünülürse, Newton'un ikinci yasası* $F = ma$ *dır. Başka bir deyişle, klasik mekanik yasaları ancak beklenen değerler için geçerlidir).*

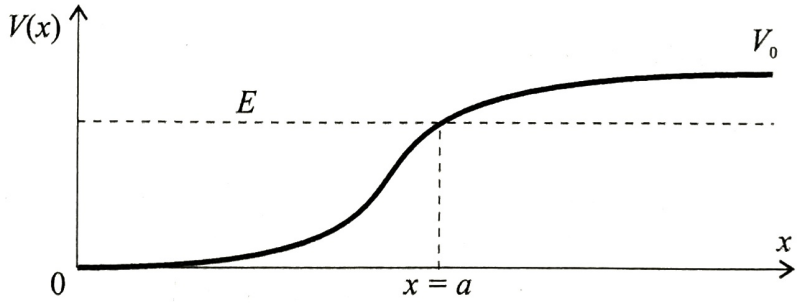
BÖLÜM 4

TEK BOYUTLU SİSTEMLER

Bir parçacığın üç boyutlu bir potansiyelde en genel hareketini incelemeden önce, pratik kazanmak amacıyla, tek boyutlu problemlere bakmak yerinde olur. Bu problemler göründüğü gibi sadece teorik ilgi kaynağı olmakla kalmazlar: Birçok fiziksel sistemde gerçekte boyutlardan biri aktif olur ve sistem tek boyuta indirgenerek incelenebilir. Öte yandan, klasik fizikte karşılığı olmayan birçok kuantum olayı (tünel olayı, enerji spektrumu,...) en yalın haliyle görmek bakımından tek boyutlu problemler ilginçtirler.

4.1 BASAMAK POTANSİYELİ

Bir düzlükte ilerleyen parçacığın gittikçe yükselen bir potansiyel engeline doğru yaklaştığını düşünelim. Şekil 4.1 de görüldüğü gibi potansiyel, düzlükte $V = 0$ iken daha sonra dereceli olarak $V = V_0$ sabit değerine yükseliyor olsun.



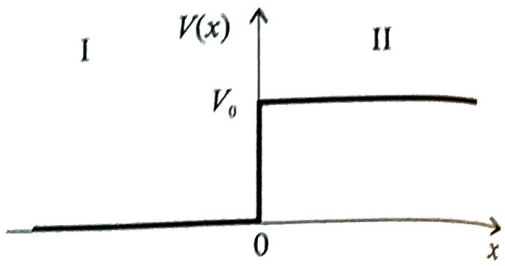
Şekil 4.1: Basamak potansiyeli

Başlangıçta, parçacığın soldan sağa doğru ilerlediğini varsayalım. Parçacık soldaki düzlükte iken hareketi *serbest* olup toplam enerjisi $E = p^2/2m$ dir. Parçacık ancak potansiyel gradyanını tırmanırken $F = -dV/dx$ kadar bir kuvvet etki eder. Klasik Mekaniğe göre burada iki durum sözkonusudur:

1. Parçacığın toplam enerjisi V_0 dan büyükse ($E > V_0$) engeli aşar ve sağdaki düzlükte yine serbest fakat toplam enerjisi $E - V_0$ olarak yoluna devam eder.

2. $E < V_0$ ise, parçacık yokuşta gittikçe yavaşlar ve $E = V(a)$ olan bir a noktasından geri döner (*klasik dönüm noktası*). Parçacığın bu durumda engelin içine sızma olanağı yoktur.

Bu klasik çerçeveyi belirttikten sonra, aynı problemi kuantum mekaniğinde inceleyelim. Matematik zorlukları en aza indirmek amacıyla, Şekil 4.2 de gösterilen şematik bir basamak potansiyelini ele alalım.



Şekil 4.2: Şematik basamak potansiyeli.

Bu potansiyel

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \text{ ise} \\ V_0 & x > 0 \text{ ise} \end{cases}$$

olarak tanımlanır. Kararlı durum dalga fonksiyonlarını bulmak üzere zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

herbir bölge için ayrı yazılırsa

I. bölgede $(x < 0)$ $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x)$$

II. bölgede $(x > 0)$ $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x)$$

olur. Bu aşamada enerjinin V_0 dan büyük veya küçük oluşuna göre çözümler farklı olur:

4.1.1 $E > V_0$ DURUMU

Herbir bölge için, sırasıyla

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \text{ve} \qquad k'^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

gibi iki pozitif dalga sayısı tanımlarsak, denklemler ve çözümleri

I. Bölge:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k^2\psi_I = 0 \quad \longrightarrow \quad \psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

ve II. Bölge:

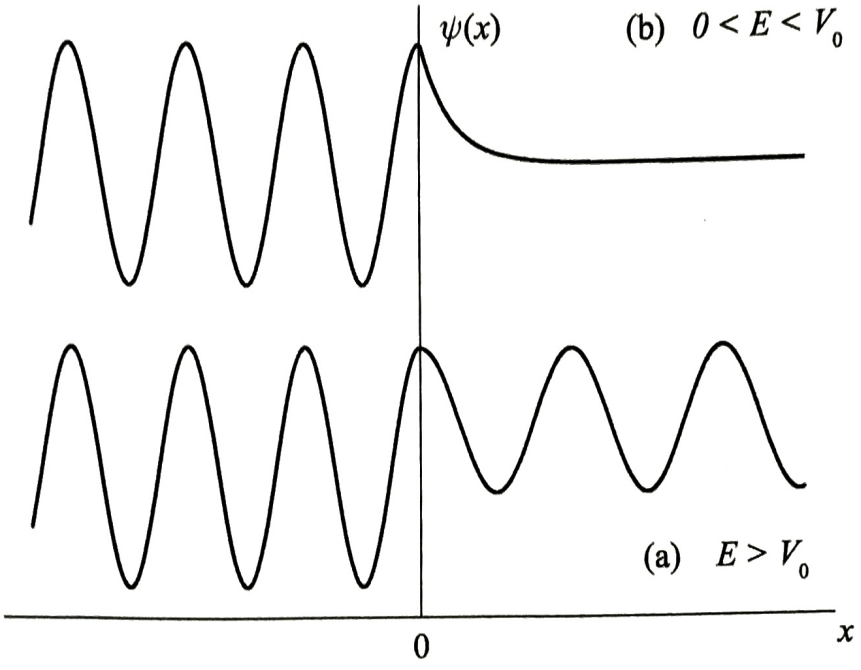
$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + k'^2\psi_{II} = 0 \quad \longrightarrow \quad \psi_{II} = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}$$

olurlar (Burada A, B, C, D integrasyon sabitleridir). Bu çözümler, her bölgede $\pm x$ yönlerinde ilerleyen düzlem dalgalardır.

Şimdi problemin başlangıç ve sınır koşullarını koyalım:

1. Başlangıçta parçacığın I. bölgeden II.ye gönderildiği varsayılmıştı. Buna göre basamak noktası ($x = 0$) dan ötede ancak sağa doğru ilerleyen bir dalga (yani, $e^{ik'x}$) oluşabilir. Bu koşulu sağlamanın tek yolu $e^{-ik'x}$ teriminin katsayısını sıfır yapmaktır:
$$D = 0$$

2. Bölüm 3 de dalga fonksiyonunun sağlaması gerekli genel koşullar incelenmişti: *Potansiyel sonlu bir sıçrama yapsa bile, dalga fonksiyonu ve onun 1.türevi sürekli olmalıdır.* Bu iki koşul $x = 0$ sınırında uygulanırsa
$$\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) \longrightarrow \quad A + B = C$$
$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0} \longrightarrow \quad ikA - ikB = ik'C$$
yazılır. Bu iki denklemden B ve C sabitleri A cinsinden bulunabilir:
$$B = \frac{k-k'}{k+k'}A \qquad \text{ve} \qquad C = \frac{2k}{k+k'}A$$



Şekil 4.3: Basamak potansiyeli çözümleri. (a) $E > V_0$ durumu, (b) $0 < E < V_0$ durumu.

Komple çözüm (Şekil 4.3a)
$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + A\dfrac{k-k'}{k+k'}e^{-ikx} & x < 0 \text{ ise} \\ A\dfrac{2k}{k+k'}e^{ik'x} & x > 0 \text{ ise} \end{cases}$$
olur. Bu çözüm klasik beklentiye tamamen uymaz: Klasik mekanikte parçacık $E > V_0$ enerjiyle ikinci bölgeye mutlaka geçiyordu. Oysa şimdi, geri yansıma olasılığı da vardır. Bu, dalga özelliğinin bir sonucudur.

Klasik dalga teorisindeki yansıma ve geçme katsayılarının benzerleri

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 \qquad \text{(Yansıma katsayısı)}$$

$$T = \frac{k'}{k}\left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{4kk'}{(k+k')^2} \qquad \text{(Geçme katsayısı)}$$

tanımlanırsa

$$R+T=1$$

olduğu kolayca görülebilir. Geçme ve yansıma olasılıklarının toplamının 1 oluşu olasılık korunumunun başka bir türlü ifadesidir.

4.1.2 $0 < E < V_0$ DURUMU

Yine, her iki bölge için pozitif sabitler

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \text{ve} \qquad \alpha^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}$$

tanımlayalım.

I. Bölge:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k^2\psi_I = 0 \qquad \longrightarrow \qquad \psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

ve II. Bölge:

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - \alpha^2\psi_{II} = 0 \qquad \longrightarrow \qquad \psi_{II} = Ce^{-\alpha x} + De^{\alpha x}$$

olurlar. Birinci bölgede yine her iki yönde ilerleyen düzlem dalga vardır. İkinci bölgede bu kez reel üstel fonksiyonlar oluşur.

Sınır koşullarına bakalım:

1. ψ_{II} nin $x \to +\infty$ de sonlu kalması gerektiğinden $e^{+\alpha x}$ terimi kabul edilemez. Bunun için

$$D = 0$$

olmalıdır.

2. Dalga fonksiyonu ve 1.türevinin $x=0$ da sürekli olma koşulları

$$\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) \qquad \longrightarrow \qquad A+B = C$$

$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0} \qquad \longrightarrow \quad ikA - ikB = -\alpha C$$

denklemlerini verir. Buradan

$$B = \frac{k-i\alpha}{k+i\alpha} \qquad \text{ve} \qquad C = \frac{2k}{k+i\alpha}$$

bulunur. Komple çözüm

$$\psi(x) = \begin{cases} A\,e^{ikx} + A\dfrac{k-i\alpha}{k+i\alpha}e^{-ikx} & x<0 \text{ ise} \\ A\dfrac{2k}{k+i\alpha}e^{-\alpha x} & x>0 \text{ ise} \end{cases}$$

olur (Şekil 4.3b).

Klasik çözümde $E < V_0$ olduğunda parçacık ikinci bölgeye kesinlikle giremiyordu. Oysa şimdi 2.bölgede $e^{-\alpha x}$ dalga fonksiyonu, dolayısıyla $|\psi|^2 = e^{-2\alpha x}$ olasılık yoğunluğu oluştuğunu görüyoruz. Bu bir çelişki midir? Hayır, çünkü gerçek bir deneyde ölçme aleti parçacık boyutlarına göre basamaktan çok uzakta ($x \to +\infty$) bulunacaktır. Bu mesafelerde bulunma olasılığı ise $\lim_{x\to\infty} e^{-2\alpha x} \to 0$ olur ve parçacık II.bölgede gözlenmez.

Bunu görmenin diğer bir yolu, yukarda tanımlanan yansıma katsayısına bakmaktır:

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left|\frac{k-i\alpha}{k+i\alpha}\right|^2 = \frac{k^2+\alpha^2}{k^2+\alpha^2} = 1$$

Bu sonuca göre de parçacık mutlaka yansıyacaktır.

Potansiyel basamağı için bulunan sonuçlar Şekil 4.3 de toplu olarak verilmiştir.

Potansiyel basamağı sonsuz ise ne olur? Yukardaki sonuçlarda $V_0 = \infty$ kullanıldığında

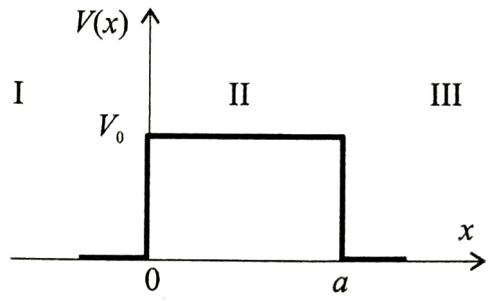
$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \to +\infty \qquad \text{ve} \qquad \psi_{II} = 0$$

bulunur. Bu sonuç geneldir: *Potansiyelin sonsuz olduğu yerde dalga fonksiyonu sıfır olur.*

4.2 POTANSİYEL ENGELİ. TÜNEL OLAYI

Bu kez şekil 4.4 te verilen kare potansiyel engelini inceleyelim.

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0<x<a \text{ ise} \\ 0 & \text{diğer yerlerde} \end{cases}$$



Şekil 4.4: Potansiyel Engeli.

4.2.1 $E > V_0$ DURUMU

Bu kez üç farklı bölge vardır. $E > V_0$ durumunda yine her üç bölgede de (farklı dalga sayılı) düzlem dalga çözümleri bulunur.

Schrödinger denklemi her üç bölge için ayrı yazılırsa

I. ve III. Bölge:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$$

II. Bölge:

$$k'^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k'^2\psi = 0$$

Başlangıçta $-\infty$ yönünden gönderilen bir parçacık için en genel çözümleri doğrudan yazabiliriz:

$$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad \psi_{II} = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}$$

$$\psi_{III} = Fe^{ikx}$$

Bu kez, $x = a$ daki sınırda da yansıma olabileceğinden, ikinci bölgede her iki yönde de ilerleyen ($e^{\pm ik'x}$) düzlem dalga aldık. Ancak, üçüncü bölgede sadece pozitif yönde ilerleyen bir dalga oluşabilir.

Şimdi sınır koşullarına bakalım:

$x = 0$ da

$$\psi_I = \psi_{II} \longrightarrow A + B = C + D$$

$$\frac{d\psi_I}{dx} = \frac{d\psi_{II}}{dx} \longrightarrow ik(A-B) = ik'(C-D)$$

ve $x = a$ da

$$\psi_{II} = \psi_{III} \longrightarrow Ce^{ik'a} + De^{-ik'a} = Fe^{ika}$$

$$\frac{d\psi_{II}}{dx} = \frac{d\psi_{III}}{dx} \longrightarrow ik'(Ce^{ik'a} - De^{-ik'a}) = ikFe^{ika}$$

olur. Bu dört denklem arasında, 5 sabitten 4 ü A cinsinden çözülebilir.

Bu katsayılardan sadece B ve F için sonucu yazalım:

$$B = \frac{(k^2 - k'^2)\sin k'a}{(k^2 + k'^2)\sin k'a + 2ikk'\cos k'a} A$$

$$F = \frac{2kk'}{e^{ika}[2kk'\cos k'a - i(k^2 + k'^2)\sin k'a]} A$$

Buradan yansıma ve geçme katsayıları yazılırsa (k ve k' nın E ve V_0 cinsinden değerlerini de kullanarak)

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{4E(E-V_0)}{V_0^2 \sin^2 k'a}\right]^{-1}$$

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{V_0^2 \sin^2 k'a}{4E(E-V_0)}\right]^{-1}$$

bulunur. $R + T = 1$ olduğu hesaplanarak görülebilir. Şekil 4.6 da geçiş katsayısının E/V_0 'ye göre değişimi verilmiştir (bu grafikte $E/V_0 > 1$ olan kısım).

Bu sonuçlar beklentilere uygundur: Yine engelden kısmi bir yansıma ve kısmen de III. bölgeye geçme olasılığı vardır.

4.2.2 $0 < E < V_0$ DURUMU

Klasik olarak $0 < E < V_0$ olduğunda parçacık engeli aşamaz ve $x = 0$ dan geri döner. Kuantal çözüm ise oldukça şaşırtıcıdır.

Schrödinger denklemi ve çözümleri her üç bölge için ayrı yazılırsa

I. ve III. Bölge:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$$

II. Bölge:

$$\alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

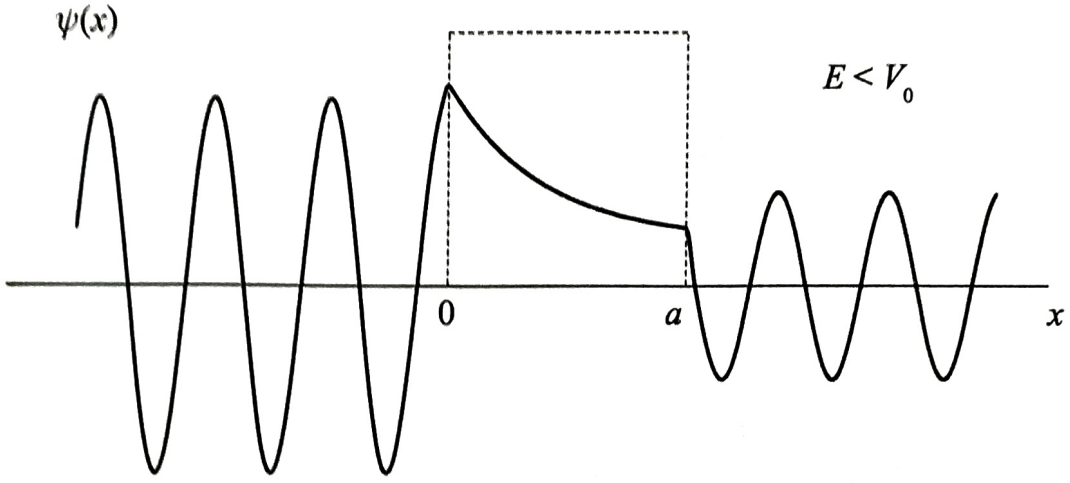
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha^2\psi = 0$$

en genel çözümler

$$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad \psi_{II} = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}$$

$$\psi_{III} = Fe^{ikx}$$

olur. Dikkat edilirse, II. bölgede $e^{\pm\alpha x}$ reel üstel fonksiyonların ikisini de almak zorunludur, çünkü $0 < x < a$ aralığında sonsuza gitme sorunu olmaz. III.bölgede ise sadece sağa doğru ilerleyen bir düzlem dalga aldık.



Şekil 4.5: Potansiyel engelinde $0 < E < V_0$ çözümü.

Şekil 4.5 de dalga fonksiyonunun her bölgedeki grafiği verilmiştir. $x = 0$ ve $x = a$ daki sınır koşulları tekrar yazılırsa,

$x = 0$ da,

$$\psi_I = \psi_{II} \longrightarrow A + B = C + D$$

$$\frac{d\psi_I}{dx} = \frac{d\psi_{II}}{dx} \longrightarrow ik(A - B) = \alpha(C - D)$$

ve $x = a$ da,

$$\psi_{II} = \psi_{III} \longrightarrow Ce^{-\alpha a} + De^{\alpha a} = Fe^{ika}$$

$$\frac{d\psi_{II}}{dx} = \frac{d\psi_{III}}{dx} \longrightarrow \alpha(Ce^{\alpha a} - De^{-\alpha a}) = ikFe^{ika}$$

olur. Bu dört denklem arasında, 5 sabitten 4 ü A cinsinden çözülebilir.

Ancak, daha kolay bir yol vardır: Yukarda incelediğimiz $E > V_0$ durumundaki sınır koşullarıyla karşılaştıralım: İki denklem sistemi arasındaki tek fark ik' yerine α gelmiş olmasıdır. O halde, yansıma ve geçme katsayıları için bulduğumuz ifadeleri

$$k' \longrightarrow -i\alpha$$

değişikliği yaparak yine kullanabiliriz. Bu değiştirme sonucu oluşan kompleks fonksiyonları da şu özdeşlikler yardımıyla indirgeyebiliriz:

$$\sinh iy = i\sin y \qquad \text{ve} \qquad \cosh iy = \cos y$$

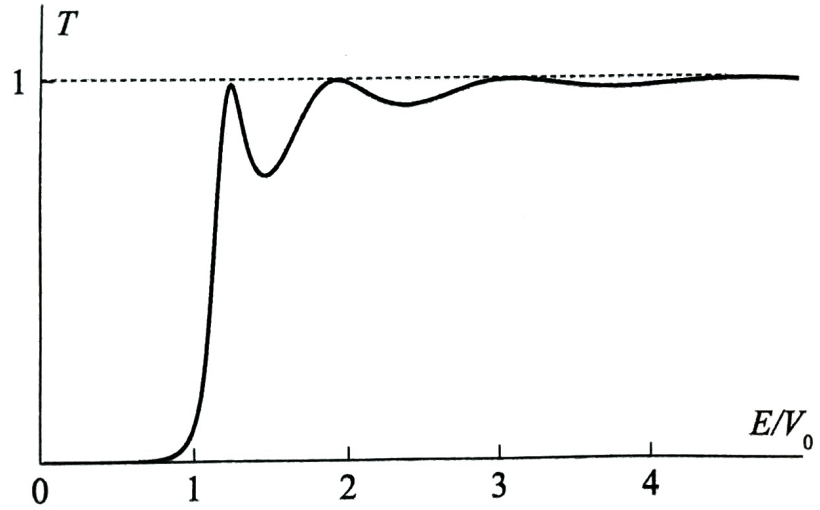
Buna göre hesap yapılırsa, yansıma ve geçme katsayıları şöyle olurlar:

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}\right]^{-1}$$

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}{4E(V_0 - E)}\right]^{-1}$$

$E < V_0$ olmasına rağmen geçiş katsayısı T, 0 ile 1 arasında sonlu bir değerdedir. Başka bir deyişle, parçacığın enerjisi engelden küçükken dahi III. bölgeye geçme olasılığı vardır! Klasik mekanikte karşılığı olmayan bu duruma *tünel olayı* denir.

Şekil 4.6 da geçiş katsayısı hem $E < V_0$ ve hem de $E > V_0$ durumları için birlikte verilmiştir.



Şekil 4.6: Geçiş katsayısının E/V_0 ile değişimi ($E/V_0 < 1$ olan bölge tünel olasılığını gösterir)

Tünelleme olasılığı (yani, T geçiş katsayısı) parçacığın enerjisine ve engelin genişliğine bağlı olarak değişir.

Tünelleme olasılığının limit değerlerini görmek üzere, yukarda T ifadesindeki boyutsuz $\alpha a = \sqrt{2m(V_0 - E)a^2}/\hbar$ parametresine bakalım:

- $\alpha a \gg 1$ ise $(V_0 - E)(2ma^2/\hbar^2) \gg 1$, veya $E \ll V_0$ demektir. Bu durumda, yaklaşık olarak

$$\sinh \alpha a = (e^{\alpha a} - e^{-\alpha a})/2 \approx e^{\alpha a}/2$$

alınabilir ve T katsayısının paydasındaki terim, yanındaki birden daha büyük olur. Böylece

$$T = \frac{16(V_0 - E)E}{V_0^2} e^{-2\sqrt{2m(V_0-E)}a/\hbar} \qquad (E \ll V_0)$$

yaklaşık ifadesi bulunur. Bu ifadeye göre, enerjisi küçük olan bir parçacığın geçiş olasılığı engelin genişliğiyle üstel olarak azalmaktadır.

- $\alpha a \ll 1$ ise $2m(V_0 - E)a^2/\hbar^2 \ll 1$, yani $E \approx V_0$ olur. Bu durumda $\sinh \alpha a \approx \alpha a$ alınabilir ve yaklaşık ifade

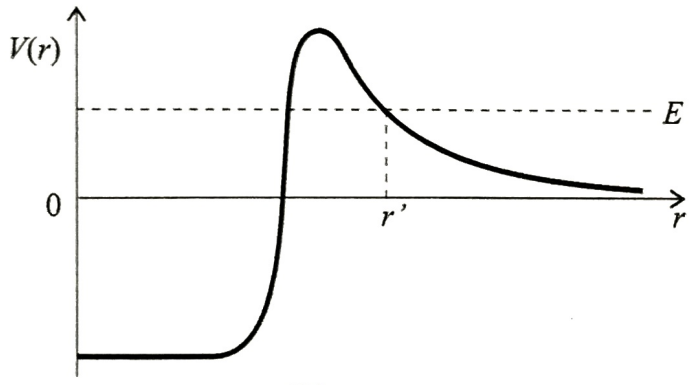
$$T = \left(1 + \frac{2ma^2V_0^2}{\hbar^2 E}\right)^{-1}$$

olur. Geçiş olasılığı yine a genişliğiyle azalmakta, fakat E değeri V_0 a ne kadar yakın olursa o kadar artmaktadır.

Alfa Bozunması :

Tünel olayı ilk kez 1928 yılında çekirdeğin alfa bozunmasına uygulandı. O zamana kadar, radyoaktif çekirdeklerin nasıl olup da α parçacıkları yayınlayabildiği açıklanamıyordu.

O yıla kadar Rutherford, çekirdeklerden alfa saçılması deneyleri sonucu bir dizi konuyu açıklığa kavuşturmuştu. Örneğin, 8.8 MeV enerjili alfa parçacıkları ile U^{238} çekirdeğinin etkileşmesine bakıldığında, ikisi arasında $V(r) = 2Ze^2/r$ gibi itici bir Coulomb potansiyelinin varlığı ortaya çıkıyordu. Gerçekten de bu enerjili alfalar $V(r') = 8.8$ MeV olan bir r' mesafesine kadar gelebiliyor ve sonra bu Coulomb etkisi nedeniyle saçılıyorlardı. Ancak bu etkileşmenin, çekirdek yarıçapı R_0 dan küçük r değerlerine gelindiğinde geçerli olmadığı diğer hafif çekirdeklerle yapılan deneylerle anlaşılmıştı. U^{238} çekirdeği içinde alfa parçacıkları yaşayabildiğine göre bu potansiyel, Şekil 4.7 de gösterildiği gibi, bir Coulomb duvarı ile çevrelenmiş bir potansiyel kuyusuna benziyordu.



Şekil 4.7: Bir α parçacığı ile U^{238} çekirdeği arasındaki potansiyel enerji.

Çelişki, bozunma sonucu yayınlanan alfaların enerjisi ölçüldüğünde 4.3 MeV bulunması sonucu ortaya çıktı. *8.8 MeV enerjili alfalar bu duvarı aşıp giremezken, nasıl oluyor da 4.3 MeV lik alfalar çekirdekten dışarı kaçabiliyorlardı*?

1928 yılında Condon, Gurney ve Gamow alfa bozunmasını bir kuantum problemi olarak ele aldılar ve alfa parçacıklarının tünel olayı yoluyla Coulomb engelini geçme

olasılığını doğru olarak hesapladılar. Kare engel için verilen yukarda bulduğumuz üstel ifade, değişken bir $V(r)$ potansiyel engeli için

$$T \approx e^{-2\int \sqrt{2m[V(r)-E]}\,dr/\hbar}$$

şeklinde yine geçerli olmaktadır.

Tünel olayının gözlenmiş olduğu daha birçok fiziksel örnek vardır. Bunlar arasında amonyum molekülünün tersine dönmesi ve tünel diyodunda elektronların bir voltaj engelini aşması sayılabilir.

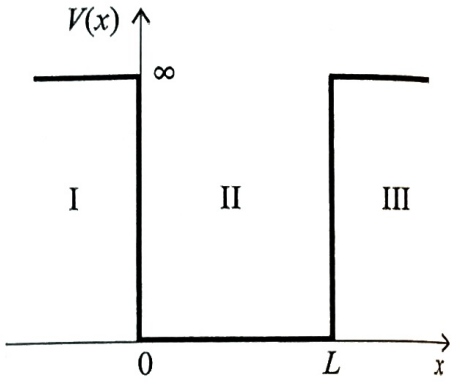
4.3 SONSUZ KUYU POTANSİYELİ

Bu kez iki potansiyel duvarı arasına hapsedilmiş bir parçacığı inceleyelim. Duvar yüksekliği sonlu da olabilir, ancak matematiğin kolaylığı açısından önce sonsuz duvarı inceleyeceğiz.

Potansiyel fonksiyonu

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \text{ ise} \\ +\infty & \text{diğer yerlerde} \end{cases}$$

olarak tanımlanır (Şekil 4.8).



Şekil 4.8: Sonsuz Kuyu Potansiyeli.

Toplam enerjisi E olan bir parçacık için Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

II.bölgede ($V = 0$) yazılırsa

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x)$$

olur. I. ve III.bölgelerde çözümü biliyoruz: Basamak potansiyelini incelerken belirtildiği üzere, potansiyelin $V = \infty$ olduğu yerde dalga fonksiyonu sıfıra eşit olmak zorundadır:

$$\psi_I(x) = \psi_{III}(x) = 0$$

II.bölgedeki çözüm yine $e^{\pm ikx}$ gibi iki düzlem dalganın toplamıdır. Ancak, bu kez çözümü reel sinüs ve kosinüs fonksiyonları cinsinden yazalım:

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \qquad (k^2 = 2mE/\hbar^2) \tag{4.1}$$

$x = 0$ ve $x = L$ duvarlarında sınır koşulları yazılırsa

$$\begin{aligned} \psi(0) = 0 \quad &\longrightarrow \quad A.0 + B.1 = 0 \\ \psi(L) = 0 \quad &\longrightarrow \quad A\sin kL + 0.\cos kL = 0 \end{aligned}$$

olur. Birinci denklemden $B = 0$ olduğu çıkar. İkinci denklemin sıfır olabilmesi için sinüs fonksiyonunun argümanı π sayısının katları olmalıdır.

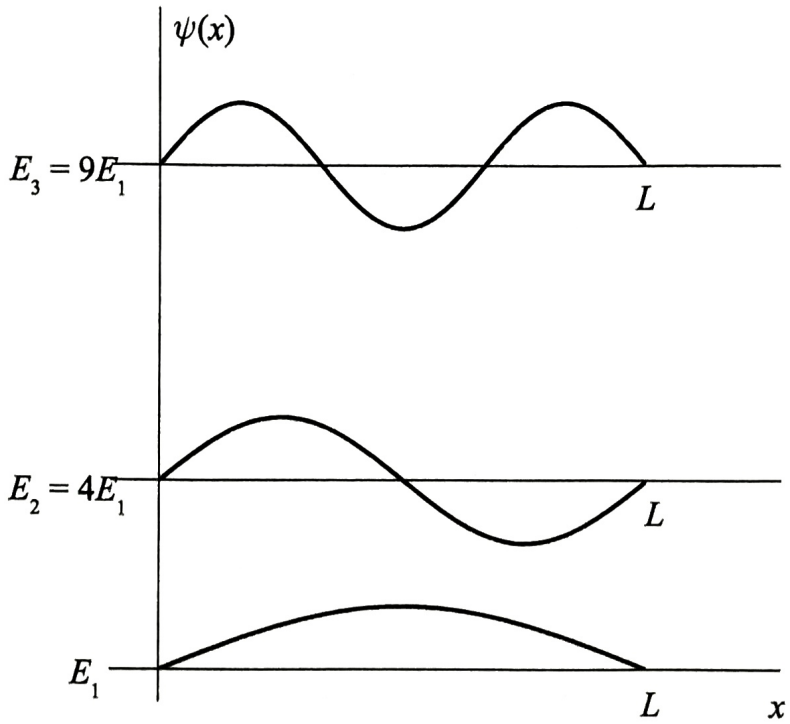
$$\begin{aligned} \sin kL &= 0 \\ kL &= \pi, 2\pi, 3\pi, \ldots \\ k_n &= \frac{n\pi}{L} \qquad (n = 1,2,3,\ldots) \end{aligned}$$

Buradan enerji hesaplanırsa,

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

bulunur.

Bu sonuca göre, potansiyel kuyusundaki bir parçacığın alabileceği enerji değerleri bir n tamsayısına bağlı olarak kesikli değerlerde bulunabilir. Başka bir deyişle, *kuantize* edilmiş enerji düzeyleri oluşur. Şekil 4.9 da ilk birkaç enerji düzeyi ve dalga fonksiyonları verilmiştir.



Şekil 4.9: Sonsuz kuyu potansiyelinde enerji düzeyleri ve dalga fonksiyonları.

Enerji ve momentumun bağlı olduğu n tamsayısına *kuantum sayısı* denir. Bu kavrama ilk defa rastlıyoruz. Daha sonra değişik kuantum sayıları görülecektir.

Dalga fonksiyonlarını normlayan A katsayıları hesaplanırsa

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\, dx = |A|^2 \int_0^L \sin^2 kx\, dx = \frac{L}{2}|A|^2 = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

bulunabilir.

Bu sonuçları özetlersek, sonsuz kuyu potansiyeli çözümü

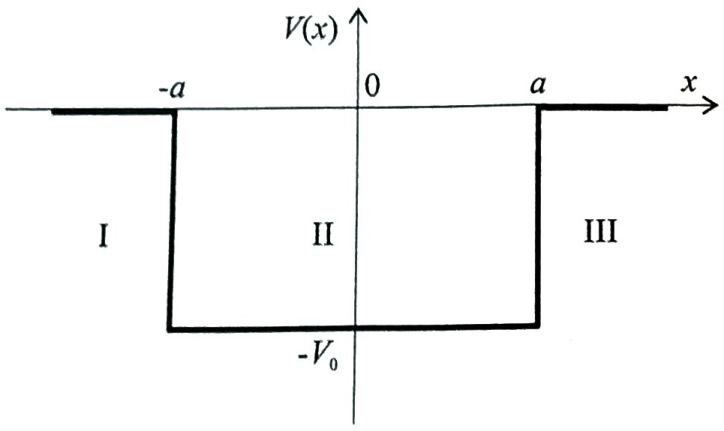
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \qquad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \tag{4.2}$$

Birçok kuyu probleminde, parçacığın E enerjisi duvarın yüksekliği V_0 dan çok küçükse, problemi bir sonsuz kuyu varsayıp işlem yapmak kolaylık sağlar, bulunan sonuçlar gerçeğe yakın olur. Örneğin, metallerde iletim elektronları, bir hacım içindeki gaz molekülleri sonsuz kuyuda parçacıklar olarak alınabilirler.

4.4 KARE KUYU POTANSİYELİ

Parçacık uzayın bir bölgesinde çekici bir potansiyelin etkisi altında bazan serbest, bazan da bağlı durumda olabiliyorsa sonlu bir kare kuyu düşünmek yerinde olur:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & -a < x < a \text{ ise} \\ 0 & |x| > a \text{ ise} \end{cases}$$



Şekil 4.10: V_0 derinliğinde kare kuyu.

Bu kez kuyu potansiyelinin genişliğini $2a$ alıp $x = 0$ etrafında simetrik olmasını sağladık. Daha sonra görüleceği gibi bu simetrik seçim, dalga fonksiyonlarının da tek veya çift simetrili olmasını sağlayacaktır.

Problemin çözümü için yine aynı yolu takip ederiz. Ancak, bu kez matematik açıdan biraz karmaşık olur.

E enerjisinin 0 dan büyük veya küçük oluşuna göre yine iki durum sözkonusudur.

4.4.1 $E > 0$ (SERBEST DURUMLAR)

Daha önceki örneklerden bilindiği üzere, $E > 0$ ise her bölgede serbest dalga çözümleri yazılabilir. Yine k ve k' dalga sayıları tanımlanır ve parçacığın sol taraftan gönderildiği varsayılırsa

I.bölgede $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ $\qquad k^2 = 2mE/\hbar^2$

II.bölgede $\psi = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}$ $\qquad k'^2 = 2m(E+V_0)/\hbar^2$

III.bölgede $\psi = Fe^{ikx}$

Yine $x = \pm a$ da ψ ve $d\psi/dx$ in sürekli olma koşulları yazılır:

$x = -a$ için

$$\psi_I = \psi_{II} \longrightarrow Ae^{-ika} + Be^{-ika} = Ce^{-ik'a} + De^{ik'a}$$

$$\frac{d\psi_I}{dx} = \frac{d\psi_{II}}{dx} \longrightarrow ik(Ae^{-ika} - Be^{-ika}) = ik'(Ce^{-ik'a} - De^{ik'a})$$

$x = +a$ için

$$\psi_{II} = \psi_{III} \longrightarrow Ce^{ik'a} + De^{-ik'a} = Fe^{-ika}$$

$$\frac{d\psi_{II}}{dx} = \frac{d\psi_{III}}{dx} \longrightarrow ik'(Ce^{ik'a} - De^{-ik'a}) = ikFe^{ika}$$

Bu 4 denklem arasından yine diğer katsayılar A cinsinden bulunabilir. Ancak, daha kolay bir yol olarak, yine daha önce incelediğimiz potansiyel engeli ile karşılaştıralım: $+V_0$ yerine $-V_0$ alındığında denklemlerdeki tek fark α yerine ik' gelmiş olmasıdır. (Ayrıca, bu kez kuyu genişliğinin $2a$ olduğunu da unutmayalım.) Şu halde aynı sonuçları

$$V_0 \to -V_0\,, \qquad \alpha \to ik' \qquad \text{ve} \qquad a \to 2a$$

değişikliği yaparak yine kullanabiliriz. Burada kompleks özdeşlikler

$$\sinh iy = i\sin y \qquad \text{ve} \qquad \cosh iy = \cos y$$

kullanıldığında, geçme katsayısı şöyle bulunur:

$$T = \frac{1}{1 + \dfrac{V_0^2}{4E(E+V_0)}\sin^2 2k'a} \tag{4.3}$$

Yansıma katsayısı R de aynı değişimle bulunabilir.

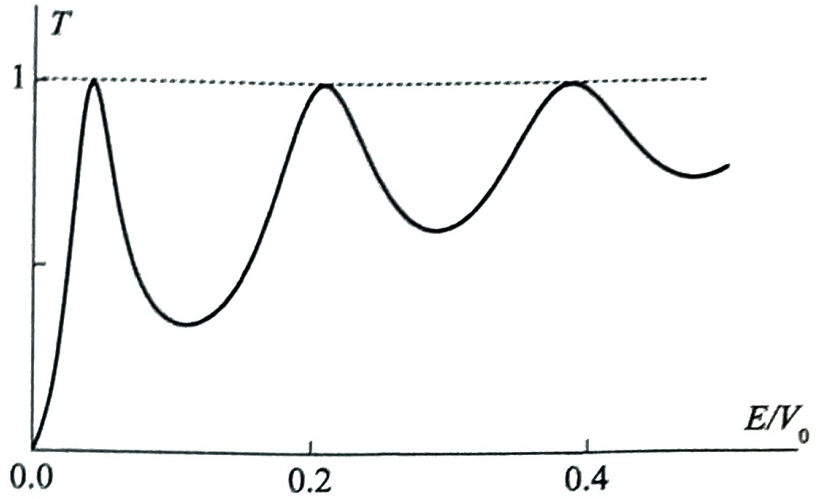
Ramsauer Olayı

Yukarda verilen geçiş katsayısı ifadesinde parçacığın enerjisi E arttıkça geçiş olasılığı T de artmaktadır. Ancak bu arada $\sin 2k'a$ faktörü de umulmadık bir etki oluşturur. $2k'a = n\pi$ olduğu E değerlerinde $\sin 2k'a = 0$ ve $T = 1$ olur, yani hiçbir yansıma olmadan, parçacık III. bölgeye geçer. Bunun için

$$2k'a = n\pi \qquad (n = 1, 2, \cdots)$$

$$E + V_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}n^2$$

olmalıdır.



Şekil 4.11: Kare kuyu potansiyelinde $E > 0$ için geçiş katsayısı. $T = 1$ olan enerji değerleri Ramsauer olayını göstermektedir.

Şekil 4.11 da T nin enerjiyle değişimi verilmiştir. *Ramsauer olayı* denilen bu durumda parçacık, sanki potansiyel kuyusunu hiç görmüyormuş gibi, rahatça geçebilmektedir. Bir örnek olarak, nadir gaz atomlarından alçak enerjili elektron saçılması deneylerinde, bazı enerji değerleri için elektronların çok az saçılmaya uğradığı gözlenmiştir.

4.4.2 $E < 0$ (BAĞLI DURUMLAR)

Parçacığın enerjisi negatif fakat $-V_0$ dan büyük ise bağlı durumlar oluşur ($E < -V_0$ durumunun fiziksel bir anlamı olmadığı denklemler yazılarak görülebilir). Yine her üç bölgede

Schrödinger denklemi

I. ve III. Bölge:	II. Bölge:
$\alpha^2 = 2m\lvert E\rvert/\hbar^2$	$k^2 = 2m(V_0 - \lvert E\rvert)/\hbar^2$
$\dfrac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha^2\psi = 0$	$\dfrac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$

olarak yazılabilir (Enerjinin negatif olduğunu bildiğimiz için mutlak değerler alıp pozitif α ve k sabitleri oluşturduk). Buna göre sonsuzda ıraksamayan en genel çözümler

I. bölgede $\psi_I = Ce^{\alpha x}$

II. bölgede $\psi_{II} = A\cos kx + B\sin kx$

III. bölgede $\psi_{III} = De^{-\alpha x}$

olmalıdır.

Kuyu duvarlarında yine sınır koşulları yazılır.

$x = \pm a$ da ψ nin sürekli olması için

$$\psi_I = \psi_{II} \longrightarrow Ce^{-\alpha a} = A\cos ka - B\sin ka$$
$$\psi_{III} = \psi_{II} \longrightarrow De^{-\alpha a} = A\cos ka + B\sin ka$$

$x = \pm a$ da $d\psi/dx$ in sürekli olması için

$$\frac{d\psi_I}{dx} = \frac{d\psi_{II}}{dx} \longrightarrow \alpha C e^{-\alpha a} = kA\sin ka + kB\cos ka$$
$$\frac{d\psi_{III}}{dx} = \frac{d\psi_{II}}{dx} \longrightarrow -\alpha D e^{-\alpha a} = -kA\sin ka + kB\cos ka$$

Yukardaki ilk iki denklem kendi aralarında toplanır ve çıkarılır. Son iki denklemde de aynı işlem yapılırsa

$$\begin{aligned} 2A\cos ka &= (C+D)e^{-\alpha a} \\ 2kA\sin ka &= \alpha(C+D)e^{-\alpha a} \\ 2B\sin ka &= -(C-D)e^{-\alpha a} \\ 2kB\cos ka &= \alpha(C-D)e^{-\alpha a} \end{aligned}$$

Bu denklemlerin dördünün birden doğru olması olanaksızdır. Bunu görmek için ilk iki denklemi taraf tarafa, son iki denklemi de taraf tarafa bölersek şu iki denklemi elde ederiz:

$$\begin{aligned} k\tan ka &= \alpha \\ k\cot ka &= -\alpha \end{aligned}$$

Bu iki denklemin birlikte doğru olması olanaksızdır. İkisini taraf tarafa çarparsak

$$k^2 = -\alpha^2$$

buluruz ki k ve α sıfırdan farklı reel sayılar oldukları için bu eşitlik çelişki oluşturur.

O halde katsayılarından birini sıfır yapmamız gerekir. Bu serbestliği iki türlü kullanırız:

- *(a) Çift çözümler:*

  Yukardaki dört denklemde $B = 0$ alırsak II.bölgedeki çözümler $\cos kx$ şeklinde çift fonksiyon olurlar. Bu durumda

  $$A \neq 0 \qquad \text{ve} \qquad C = D$$

  $$\boxed{k\tan ka = \alpha \qquad \psi_{II}(x) = A\cos kx \quad \text{(Çift çözümler)}} \tag{4.4}$$

  denklemleri bulunur.

- *(b) Tek çözümler:*

  Bu kez $A = 0$ seçilirse II.bölgedeki çözümler $\sin kx$ şeklinde tek fonksiyon olurlar. Bu durumda

  $$B \neq 0 \qquad \text{ve} \qquad C = -D$$

  $$\boxed{k\cot ka = -\alpha \qquad \psi_{II}(x) = B\sin kx \quad \text{(Tek çözümler)}} \tag{4.5}$$

  denklemleri bulunur.

Şimdi, enerji özdeğerlerini veren bu $\tan ka$ ve $\cot ka$ denklemlerinin çözümlerini ele alalım.

KARE KUYUDA ENERJİ ÖZDEĞERLERİ

Yukarda k ve α için bulunan iki denklem (4.4 ve 4.5) ayrı ayrı çözülerek parçacığın enerjisi elde edilebilir. Bu iki denklemin analitik çözümü yoktur. Burada grafik bir yöntemle yaklaşık çözümleri bulup, bazı sonuçlara varmaya çalışacağız. Önce

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \quad \text{ve} \quad k = \frac{\sqrt{2m(V_0 - |E|)}}{\hbar}$$

değişkenlerini u ve v gibi iki boyutsuz değişken haline getirelim:

$$u = ka \quad \text{ve} \quad v = \alpha a$$

Bu iki değişken arasında şöyle bir bağıntı vardır:

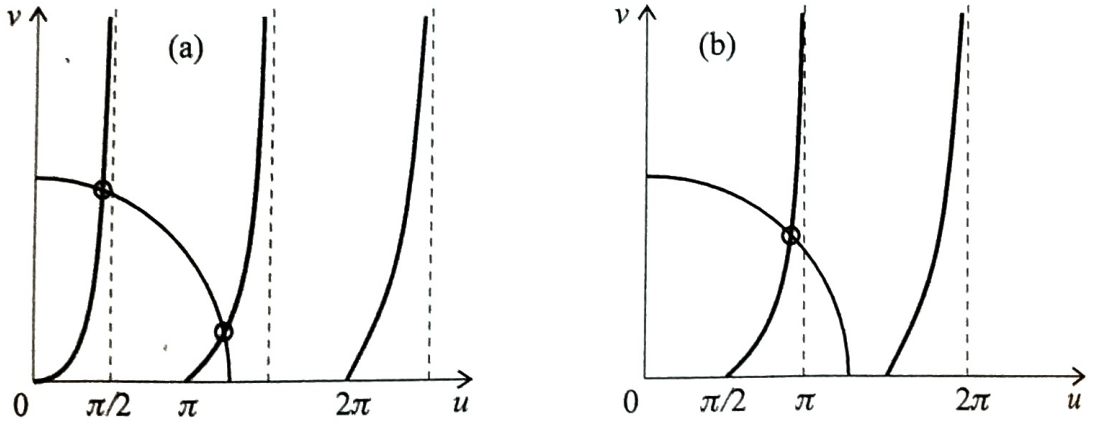
$$u^2 + v^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = R^2 \qquad (R = \sqrt{2mV_0a^2}/\hbar)$$

olur ki bu, uv- koordinatlı bir düzlemde R yarıçaplı bir çemberin denklemidir. Çözümler bu çemberin üzerinde bir yerde oluşacak demektir.

Çift ve tek pariteli çözüm denklemleri de bu u, v değişkenleri cinsinden

$$v = u\tan u \qquad \text{ve} \qquad v = -u\cot u$$

yazılıp, yine aynı uv- koordinatlı düzlemde grafikleri çizilirse, Şekil 4.12 daki durum elde edilir.



Şekil 4.12: $u^2 + v^2 = R^2$ çemberi ve (a) $v = u\tan u$, (b) $v = -u\cot u$ eğrileri. Çember ile kesişme noktaları bağlı durum enerjilerini verir.

Grafik çözümden çıkan önemli sonuçlar şöyle sıralanabilir:

- Potansiyel kuyusunun V_0 derinliği ve $2a$ genişliği verildiğinde uv- düzlemindeki çemberin yarıçapı belirlenmiş demektir. Burada önemli olan V_0a^2 çarpımının büyüklüğüdür. Bu çarpım ne kadar büyükse R yarıçapı da o kadar büyük olur.

- tanjant ve kotanjant eğrileri sırasıyla, $\pi/2, 3\pi/2, 5\pi/2, \ldots$ ve $\pi, 2\pi, 3\pi, \ldots$ değerlerinde asimtotik olarak sonsuza gitmektedirler. Bir R yarıçaplı çember bu eğrileri sırayla keser. Yani, tek ve çift pariteli çözümlerin enerji özdeğerleri büyüklük bakımından almaşıklı olarak sıralanırlar.

- tanjant eğrisi 0 değerinden başlayıp artmakta, kotanjant eğrisi ise ancak $\pi/2$ değerinde başlamaktadır. Buna göre, *R yarıçapı (yani, V_0a^2 değeri) ne kadar küçük olsa bile çift pariteli bir çözüm mutlaka vardır.* Tek pariteli çözüm ise ancak $R \geq \pi/2$ için oluşabilir. O halde, sadece bir bağlı durum olabilmesi için koşul

$$R < \frac{\pi}{2} \qquad \text{veya} \qquad V_0a^2 < \frac{\hbar^2\pi^2}{8m}$$

olur. (Bu özellik nükleer fizikte döteronun bağlanma enerjisini bulmakta kullanılır.)

- Potansiyel kuyusu gittikçe derinleşir veya genişlerse V_0a^2 çarpımı, yani çemberin R yarıçapı da o kadar büyür. Çemberin tanjant ve kotanjant eğrileriyle kesişim noktaları gittikçe asimtot değerlerine yakın olmaya başlar ($u \approx n\pi/2$). Bu durumda yaklaşık çözümler yazılırsa

$$u \approx n\pi/2 \qquad E_n \approx \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}n^2 \quad (n = 1,2,3,\ldots)$$

olduğu yani, sonsuz kuyu enerji düzeylerini bulduğumuz ortaya çıkar.

4.5 HARMONİK SALINICI

Bir denge konumu etrafında harmonik salınımlar yapan bir parçacığın hareketi, fiziğin en temel problemlerinden birini oluşturur. Değişik bir çok fiziksel sistemin (diatomik moleküllerin titreşimi, kristal örgülerde atomların veya çekirdek içinde nükleonların salınımları,..vs.) temel yapısı bir harmonik salınıcı problemidir. Burada vereceğimiz harmonik salınıcının kuantal incelenmesi, tüm bu sistemlerin fiziksel davranışlarını doğru olarak tanımlayabilmektedir. Ayrıca, elektromanyetik alanların kuantum teorisi yapılmak istendiğinde, harmonik salınıcı temsilleri anahtar bir rol oynar (Kuantum Alanlar teorisi denilen bu konu kapsamımız dışındadır).

Salınıcı problemine iki farklı şekilde yaklaşılabilir: Bir yöntem Schrödinger diferansiyel denklemini doğrudan çözmektir. Diğer zarif bir yöntemde ise salınıcı hamiltonyeni bir takım operatörler cinsinden yazılır ve operatör cebiri yardımıyla sonuca varılır. Burada diferansiyel denklem çözümü verilecektir.

Kütlesi m olan ve bir denge konumundan x uzaklığına bağlı olarak $F = -kx$ gibi bir kuvvetin etkisinde hareket eden bir parçacık ele alalım. Bu sistemin toplam enerjisi

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

olarak yazılabilir. Burada $\omega = \sqrt{k/m}$ açısal frekanstır.

Klasik mekanik sonuçlarını hatırlatalım: Verilen bir E toplam enerjisi için parçacığın x konumu, $x = A\cos\omega t$ şeklinde periyodik olarak $[-A, +A]$ değerleri arasında değişir. Burada A genliği, $E = \frac{1}{2}kA^2$ bağıntısı ile sınırlı olup, E enerjisi her değeri alabilir.

Kuantal çözümü bulmak üzere Schrödinger denklemi yazılırsa

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(x) = E\psi(x)$$

olur. Matematik işlemleri kolaylaştırmak üzere bu denklem boyutsuz hale getirilir.

Her denklem boyutsuz hale getirilebilir. Bu tekniği burada ayrıntılı olarak görelim. Önce bağımsız x değişkenini boyutsuz yapan bir α sabiti olduğunu varsayılır. Buna göre, yeni bağımsız değişken

$$\rho = \alpha x$$

olur (α nın nasıl bulunacağı daha sonra ortaya çıkacaktır). $d^2/dx^2 = \alpha^2 d^2/d\rho^2$ olduğu gözönüne alınırsa Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\frac{d^2\psi}{d\rho^2} + \frac{m\omega^2}{2\alpha^2}\rho^2\psi = E\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{d\rho^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2\alpha^4}\rho^2\right]\psi = 0$$

olarak yazılabilir. Şimdi ρ^2 nin katsayısını 1 yapan α değeri seçilir:

$$\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2\alpha^4} = 1 \qquad \text{veya} \qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

olur. Daha sonra E enerji terimini boyutsuz yapan bir λ sabiti seçilir:

$$\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2} = \lambda \qquad \text{veya} \qquad E = \frac{\hbar\omega}{2}\lambda \tag{4.6}$$

Sonuç olarak, boyutsuz Schrödinger denklemi yazılabilir:

$$\frac{d^2\psi}{d\rho^2} + (\lambda - \rho^2)\psi = 0$$

Diferansiyel Denklemin Çözümü

Bir fikir edinmek üzere $\rho \to \pm\infty$ limit değerlerinde ψ çözümünün davranışına bakalım. Bu ρ değerleri için λ lı terim küçük kalacağından ihmal edilebilir ve yaklaşık denklem

$$\frac{d^2\psi}{d\rho^2} - \rho^2\psi = 0$$

olur. Bunun çözümü $\psi \simeq e^{-\rho^2/2}$ olur.

Acaba, sonlu ρ değerleri için de bu asimtotik davranışı gösteren çözümler bulabilir miyiz?

$$\psi(\rho) = e^{-\rho^2/2}\,u(\rho)$$

şeklinde çözümler arayalım (sonsuzda sınırlı kalabilmek için negatif üslü çözüm alınır). Bu çözümü boyutsuz Schrödinger denkleminde kullanmak üzere

$$\begin{aligned}\frac{d\psi}{d\rho} &= (u' - \rho u)e^{-\rho^2/2} \\ \frac{d^2\psi}{d\rho^2} &= [u'' - 2\rho u' + (\rho^2 - 1)u]e^{-\rho^2/2}\end{aligned}$$

ifadeleri hesaplanırsa, yeni $u(\rho)$ fonksiyonunun sağlayacağı denklem

$$u'' - 2\rho u' + (\lambda - 1)u = 0 \tag{4.7}$$

olur. Bu denklem *kuvvet serisi* veya *Frobenius* yöntemi ile çözülebilir. Bunun için, $u(\rho)$ fonksiyonu bir kuvvet serisi olarak yazılır:

$$\begin{aligned}u(\rho) &= c_0 + c_1\rho + c_2\rho^2 + c_3\rho^3 + \cdots \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho^m\end{aligned}$$

c_m katsayıları bulunursa $u(\rho)$ fonksiyonu bulunmuş olur. Bu seri cinsinden $u'(\rho)$ ve $u''(\rho)$ ifadelerini hesaplayalım:

$$\begin{aligned}u'(\rho) &= c_1 + 2c_2\rho + 3c_3\rho^2 + \cdots = \sum_{m=0}^{\infty} m c_m \rho^{m-1} \\ u''(\rho) &= 2c_2 + 3c_3\rho + 4c_4\rho^2 + \cdots = \sum_{m=0}^{\infty} (m+2)(m+1)c_{m+2}\rho^m\end{aligned}$$

olur. Bu ifade yukardaki (4.7) diferansiyel denkleminde kullanılırsa

$$\sum_{m=0}^{\infty} (m+2)(m+1)c_{m+2}\rho^m - 2\rho \sum_{m=0}^{\infty} m c_m \rho^{m-1} + (\lambda - 1)\sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho^m = 0$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} (m+2)(m+1)c_{m+2}\rho^m - 2\sum_{m=0}^{\infty} m c_m \rho^m + (\lambda - 1)\sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho^m = 0$$

ve aynı ρ^m kuvvetlerinin katsayıları biraraya toplanırsa

$$\sum_{m=0}^{\infty} \Big[(m+2)(m+1)c_{m+2} - 2mc_m + (\lambda - 1)c_m\Big]\rho^m = 0$$

yazılabilir. Bu eşitliğin her ρ değerinde ve her ρ^m kuvveti için geçerli olması bir tek şekilde mümkündür: her ρ^m kuvveti katsayısının sıfır olması. Buna göre

$$(m+2)(m+1)c_{m+2} - 2mc_m + (\lambda - 1)c_m = 0$$

olmalıdır. Buradan c_m katsayıları arasında bir *tekrarlama* (rekürans) bağıntısı elde edilir:

$$c_{m+2} = \frac{2m + 1 - \lambda}{(m+1)(m+2)} c_m$$

Kuvvet serisinin ilk iki katsayısı olan c_0 ve c_1 katsayıları biliniyorsa, diğer katsayılar bu bağıntı yardımıyla türetilebilir. Bu katsayıların oluşturduğu sonsuz terimli seri, aradığımız $u(\rho)$ fonksiyonu olacaktır.

Ancak, burada bir sorun karşımıza çıkar: Bu sonsuz terimli seri çözümü yakınsak mıdır? Aksi takdirde dalga fonksiyonu olarak kabul edilemez. Eğer, bu seri için kapalı bir ifade bulabilseydik, yakınsaklığını kontrol etmek kolay olurdu. Bunu yapamadığımız için, dolaylı bir yol izleyelim: Ardışık katsayıların oranı olan c_{m+2}/c_m ifadesinin m indisi büyüdükçe nasıl değiştiğine bakalım:

$$\lim_{m\to\infty} \frac{c_{m+2}}{c_m} = \lim_{m\to\infty} \frac{2m+1-\lambda}{(m+1)(m+2)} \to \frac{2}{m}$$

Bu serinin davranışının e^{ρ^2} fonksiyonu gibi olduğunu görelim:

$$e^{\rho^2} = 1+\rho^2+\frac{\rho^4}{2!}+\cdots = \sum_{m\ \text{çift}} \frac{\rho^m}{(m/2)!}$$

olduğu gözönüne alınırsa bu serinin katsayılarının asimtotik davranışı

$$\lim_{m\to\infty} \frac{c_{m+2}}{c_m} = \lim_{m\to\infty} \frac{(m/2)!}{(m/2+1)!} = \frac{1}{m/2+1} \to \frac{2}{m}$$

yine $u(\rho)$ nun davranışı gibidir. Yani, serinin başlangıç terimleri farklı olabilir, ama ρ^m kuvvetleri yükseldikçe iki seri de aynı davranışı gösterecektir.

Buradan anlaşılır ki, $u(\rho)$ serisi e^{ρ^2} gibi davranıyorsa, ψ dalga fonksiyonu

$$\psi = e^{-\rho^2/2}u(\rho) \to e^{-\rho^2/2} \times e^{\rho^2} \to e^{+\rho^2/2}$$

gibi davranacak, yani sonsuzda ıraksak olacaktır. O halde, sonsuz terimli seri çözümü kabul edilemez.

Bu güçlüğü aşmanın bir yolu vardır: c_m katsayılarını veren ifadeye tekrar bakalım:

$$c_{m+2} = \frac{2m+1-\lambda}{(m+1)(m+2)} c_m$$

m indisi 0,1,2,... gibi artmakta iken, öyle bir $m=n$ değerine geldiğimizde pay sıfır olursa ne olur? Seri bu ρ^n değerinde biter, çünkü bu c_n değerinden itibaren $c_{n+2}=c_{n+4}=\cdots=0$ olacak demektir. Böylece, $u(\rho)$ çözümleri birer polinom olurlar.

Bunun gerçekleşmesi için, belli bir n tamsayı değerinde

$$2n+1-\lambda = 0$$

olmalıdır. λ katsayısının tanımı (Denklem 4.6) hatırlanırsa

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n=0,1,2,\cdots) \tag{4.8}$$

olur. Böylece, seri çözümlerinin dalga fonksiyonu olabilme koşulunu sağlamasını isteyerek enerji özdeğerlerini bulmuş oluyoruz. Şimdi, dalga fonksiyonlarını bulabiliriz. Önce $u_n(\rho) = \sum_{m=1}^{n} c_m \rho^m$ polinomlarını oluşturmak üzere c_m katsayılarını bulalım. Tekrarlama bağıntısı yazılırsa (artık $\lambda = 2n+1$ olduğunu hatırlayalım.)

$$c_{m+2} = \frac{2(m-n)}{(m+1)(m+2)}\, c_m$$

Bu katsayıları hesaplarken c_0 ve c_1 serbestçe seçilebilir. Özel olarak, $c_0 = 1$ ve $c_1 = 0$ değerleri seçilirse *çift* çözümler, $c_0 = 0$ ve $c_1 = 2$ değerleri seçilirse *tek* çözümler olmak üzere, matematikte bilinen özel polinomlar ailesinden *Hermite polinomları* $H_n(\rho)$ elde edilir.

$$u_n(\rho) = H_n(\rho)$$

İlk birkaç Hermite polinomunu açık yazalım:

$$\begin{aligned} H_0(\rho) &= 1 \\ H_1(\rho) &= 2\rho \\ H_2(\rho) &= 4\rho^2 - 2 \\ H_3(\rho) &= 8\rho^3 - 12\rho \end{aligned}$$

Hermite polinomlarının özellikleri

Matematikte bazı diferansiyel denklemlerin çözümleri ancak bazı özel polinom aileleri cinsinden ifade edilebilir. Diğer örnekleri daha sonra göreceğiz. Aşağıda vereceğimiz kavramlar herbir özel polinom ailesi için değişik şekillerde vardır:

- **Parite:** Her H_n polinomunun mertebesi n olup, n nin tek veya çift oluşuna göre, tek veya çift fonksiyondur:

$$H_n(-\rho) = \begin{cases} -H_n(\rho) & n \text{ tek ise} \\ H_n(\rho) & n \text{ çift ise} \end{cases}$$

- **Tekrarlama bağıntısı:** Ardışık Hermite polinomları arasında

$$H_{n+1} = 2\rho H_n - 2nH_{n-1}$$

bağıntısı vardır.

- **Türev bağıntısı:**

$$H_n' = 2nH_{n-1}$$

- **Diklik bağıntısı:**

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\rho\, \mathrm{e}^{-\rho^2}\, H_n(\rho) H_m(\rho) = \sqrt{\pi} 2^n n!\, \delta_{nm} \tag{4.9}$$

Bu ifadeye göre, iki Hermite polinomunu $e^{-\rho^2}$ gibi bir *ağırlık fonksiyonu* ile çarpıp tüm uzaydaki integrali alınırsa, $m \neq n$ ise sıfır bulunur. Başka bir deyişle, Hermite polinomları dik (ortogonal) dirler.

- **Üretici fonksiyon:** Öyle bir $G(\rho,s)$ fonksiyonu vardır ki, bunun s parametresine göre Taylor açılımı yapıldığında, katsayılar Hermite polinomlarını oluşturur:

$$G(\rho,s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\rho)\, s^n$$

Hermite polinomları için üretici fonksiyonun

$$G(\rho,s) = e^{-s^2+2\rho s}$$

olduğu, Taylor açılımında ilk birkaç terim hesaplanarak kontrol edilebilir.

- **Rodrigues formülü:** Öyle bir basit fonksiyon vardır ki, bunun n kez türevi alınırsa $H_n(\rho)$ polinomuyla orantılı olur. Hermite polinomları için bu basit fonksiyon $\exp(-\rho^2)$ dir:

$$H_n(\rho) = (-1)^n e^{\rho^2} \frac{d^n}{d\rho^n} e^{-\rho^2}$$

olacağı kontrol edilebilir.

Harmonik Salınıcı Dalga Fonksiyonları

Başlangıçta $\psi(x) = e^{-\rho^2/2} u(\rho)$ seçtiğimiz hatırlanırsa, harmonik salınıcı dalga fonksiyonları da n kuantum sayısına bağlı olarak

$$\psi_n(x) = A_n e^{-\rho^2/2} H_n(\rho) \qquad (\rho = \alpha x \quad \text{ve} \quad \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}) \tag{4.10}$$

bulunurlar. A_n sabitini bulmak üzere dalga fonksiyonunu normlayalım:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\psi_n(x)|^2 &= \frac{|A_n|^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho\, e^{-\rho^2/2} H_n(\rho)\, e^{-\rho^2/2} H_n(\rho) \\ &= \frac{|A_n|^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho\, e^{-\rho^2} H_n(\rho) H_n(\rho) \end{aligned}$$

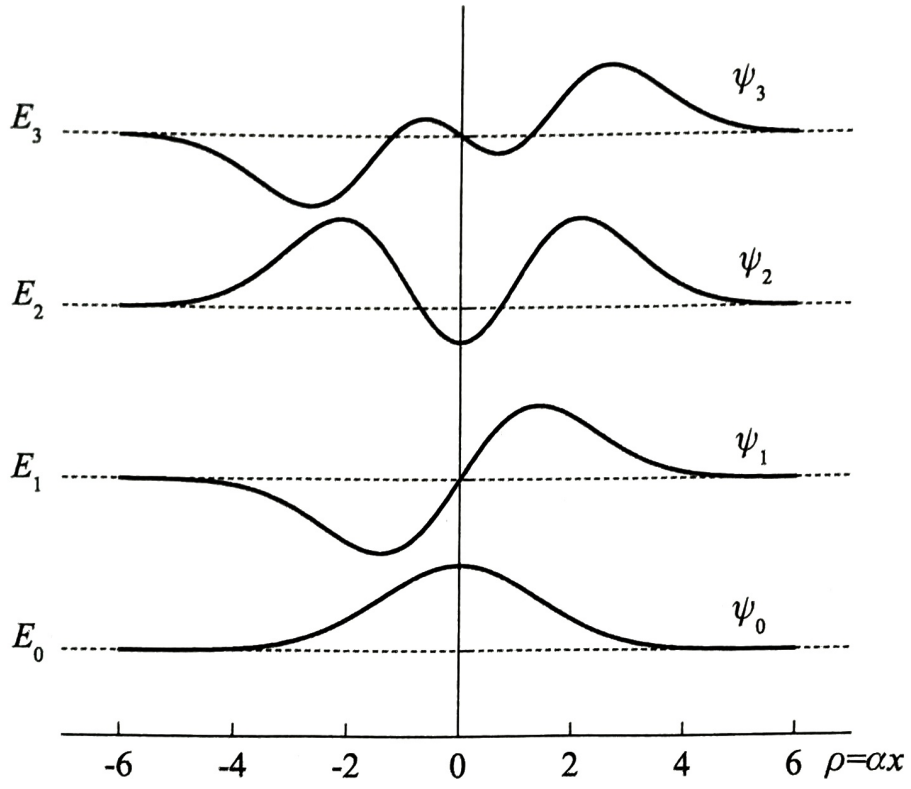
bu son integral Hermite polinomları için diklik bağıntısıdır ($m = n$). Bunun değeri yazılırsa

$$A_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}}$$

bulunur.

Özetlersek,harmonik salınıcı dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerleri

$$\boxed{\psi_n(x) = A_n H_n(\alpha x)\, e^{-\alpha^2 x^2/2} \qquad E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega} \tag{4.11}$$



Şekil 4.13: Harmonik salınıcı enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları.

Şekil 4.13 de harmonik salınıcı dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerlerinden birkaçı verilmiştir.

Şimdi bu sonuçları değerlendirelim:

- E_n özdeğerlerinin kuantize olduğunu ve eşit $\hbar\omega$ aralıkla sıralandıklarını görüyoruz. Gerçekten de, diatomik moleküllerin titreşim yoluyla uyarılması sonucu elde edilen spektrumlarda her bir radyasyonun frekansı, doğal frekans denilen bir ν_0 değerinin tam katları olmaktadır.

- Taban durumu ($n = 0$) enerjisinin sıfırdan farklı oluşu tamamen bir kuantal etkidir. Eğer $E_0 = 0$ olsaydı parçacık hem durgun ($p = 0$) ve hem de denge konumunda ($x = 0$) olurdu; bu da, momentum ve konumun birlikte kesin olarak bilinmesi anlamına gelirdi ki belirsizlik ilkesine uymazdı. Bu $\hbar\omega/2$ değerine *sıfır-noktası enerjisi* denir. Taban durumu dalga fonksiyonu yazılırsa

$$\psi_0(x) = (\alpha^2/\pi)^{1/4}\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

  bir Gauss eğrisi olarak ortaya çıkar.

- Hermite polinomlarının simetrisi salınıcı dalga fonksiyonlarında da kendini gösterir: Buna göre, n kuantum sayısının tek veya çift oluşuna göre ψ_n dalga fonksiyonları da tek ve çift paritelidir:

$$\psi_n(-x) = (-1)^n\, \psi_n(x)$$

- Herbir ψ_n dalga fonksiyonunun tam n tane reel kökü (veya, düğüm noktası) vardır. Bu özellik çok geneldir: *enerji arttıkça dalga fonksiyonun düğüm noktaları sayısı da artar.*

Alıştırma 4.1 : Bir n durumunda verilen harmonik salınıcı için (a) konumun ve momentumun beklenen değerini, (b) Belirsizlikler çarpanını ($\Delta x \Delta p$) bulun.

Çözüm :

(a) n durumundaki salınıcı dalga fonksiyonu ψ_n için

$$\begin{aligned} <x> &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x|\psi_n(x)|^2 \\ <p> &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_n(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi_n(x) \end{aligned}$$

olur. Dalga fonksiyonlarının belli paritelerde olduğunu biliyoruz. Bu durumda $|\psi_n|^2$ mutlaka çift fonksiyon, $x|\psi_n|^2$ çarpımı ise mutlaka tek fonksiyon olacaktır ve integrali sıfır olur. Diğer yandan, türev işlemi sonucu fonksiyonun paritesi tersine çevrilir, yani tek fonksiyonun türevi çift fonksiyon, çift fonksiyonun türevi de tek fonksiyon olur. Bu durumda, $\psi_n d\psi_n/dx$ çarpımı da mutlaka tek fonksiyon olacaktır ve integrali sıfır olur.

$$<x>=0 \qquad \text{ve} \qquad <p>=0$$

(b) $<x>=<p>=0$ olduğuna göre standard sapmalar $\Delta x^2 = <x^2>$ ve $\Delta p^2 = <p^2>$ olacak demektir. Önce $<x^2>$ yi hesaplayalım:

$$<x^2>= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_n x^2 \psi_n = \frac{A_n^2}{\alpha^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\rho\, e^{-\rho^2} \rho^2 H_n^2(\rho)$$

Bu ifadedeki ρH_n çarpımını Hermite polinomlarının tekrarlama bağıntısından çekip alırsak

$$\begin{aligned} \rho H_n &= \tfrac{1}{2} H_{n+1} + n H_{n-1} \\ \rho^2 H_n^2 &= \tfrac{1}{4} H_{n+1}^2 + n H_{n-1} H_{n+1} + n^2 H_{n-1}^2 \end{aligned}$$

olur. Bu ifade integral içinde kullanıldığında $H_{n-1}H_{n+1}$ çarpımlı terim diklik bağıntısından sıfır verecektir. Diğer iki terimde $n = n+1$ ve $n = n-1$ için diklik bağıntısı sonucu kullanılırsa

$$<x^2>= \frac{A_n^2}{\alpha^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\rho\, e^{-\rho^2} \left[\frac{1}{4} H_{n+1}^2 + n^2 H_{n-1}^2\right] = \frac{A_n^2}{\alpha^3} \left[\frac{1}{4} \frac{\alpha}{A_{n+1}^2} + \frac{n^2 \alpha}{A_{n-1}^2}\right]$$

Normlama sabiti daha önce bulunmuştu. Sonuç olarak

$$\begin{aligned} A_n^2 &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}, \qquad \left[\frac{A_n}{A_{n+1}}\right]^2 = 2(n+1), \qquad \left[\frac{A_n}{A_{n-1}}\right]^2 = \frac{1}{2n} \\ <x^2> &= \frac{1}{\alpha^2}(n+\frac{1}{2}) = \frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2}) \end{aligned}$$

bulunur. Benzer yöntemle $< p^2 >$ beklenen değeri de bulunabilir. Ancak, daha kolay bir yöntem vardır: Toplam enerji $E = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$ nin beklenen değerinin $(n+1/2)\hbar\omega$ olduğunu biliyoruz. Buradan $< p^2 >$ elde edilebilir:

$$\begin{aligned} < E > &= (n+\frac{1}{2})\hbar\omega \\ \frac{< p^2 >}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 < x^2 > &= (n+\frac{1}{2})\hbar\omega \\ \frac{< p^2 >}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2}) &= (n+\frac{1}{2})\hbar\omega \\ < p^2 > &= \hbar m\omega(n+\frac{1}{2}) \end{aligned}$$

olur. Sonuç olarak belirsizlik çarpanını yazabiliriz:

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{< x^2 >< p^2 >} = (n+\frac{1}{2})\hbar$$

Alıştırma 4.2: Momentum Uzayında Harmonik Salınıcı Problemi: (a) Harmonik salınıcının momentum uzayı dalga fonksiyonu $\phi(p)$ nin sağladığı denklemi bulun. (b) Bu denklemin çözümleri olan $\phi_n(p)$ dalga fonksiyonlarını bulun.

Çözüm :

(a) Ters Fourier dönüşümü yazılırsa

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \phi(p)\, e^{ipx/\hbar}\, dp$$

Bu ifadeyi Schrödinger denkleminde kullanalım ve tüm terimleri aynı integral içinde yazalım:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) &= E\psi(x) \\ \int_{-\infty}^{\infty}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - E\right]\phi(p)\, e^{ipx/\hbar}\, dp &= 0 \end{aligned}$$

Bu integral içinde (d^2/dx^2 ve x^2) işlemleri sadece $e^{ipx/\hbar}$ faktörüne etkimektedir. Bunları değişik yazarsak

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} e^{ipx/\hbar} &= -\frac{p^2}{\hbar^2} e^{ipx/\hbar} \\ x^2 e^{ipx/\hbar} &= -\hbar^2 \frac{d^2}{dp^2} e^{ipx/\hbar} \end{aligned}$$

olur. Bu son ifade, momentum uzayında $\hat{x}$ konum operatörünün $(i\hbar)d/dp$ olacağını gösterir. Bu yazılımlar sonucu

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{d^2}{dp^2} - E\right]\phi(p)\, e^{ipx/\hbar}\, dp = 0$$

bulunur. İntegral içindeki üstel fonksiyon sıfır olamıyacağına göre, bunun çarpanı her p değeri için sıfır olmalıdır:

$$\left[\frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{d^2}{dp^2} - E\right]\phi(p) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2 m\omega^2}{2}\frac{d^2\phi}{dp^2} + \frac{1}{2m}p^2\phi(p) = E\phi(p)$$

Bu, momentum uzayında Schrödinger denklemidir.

(b) Momentum uzayındaki denklem x uzayındaki denklemle büyük benzerlik göstermektedir. Birinden diğerine geçmek için

$$x \longrightarrow p$$

$$m \longrightarrow \frac{1}{m\omega^2}$$

değişimlerini yapmak yeterlidir. Bu sonuca göre diferansiyel denklemi yeniden çözmek gerekmez. Momentum uzayı dalga fonksiyonları

$$\phi_n(p) = B_n e^{-\beta^2 p^2/2} H_n(\beta p)$$

$$\beta = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}$$

olarak yazılabilirler. Momentum uzayında da aynı Schrödinger denkleminin elde edilmesi, ancak harmonik salınıcı potansiyelinde görülen bir özelliktir.

4.5.1 KARŞILIĞI BULUNMA İLKESİ

Kuantum mekaniğinin temel ilkelerinden birini burada harmonik salınıcı örneği üzerinde inceleyelim. Bohr tarafından ortaya konulan bu ilkeye göre, *kuantum mekaniğinin sonuçları, uygun limitlerde, klasik mekaniğin sonuçlarına yaklaşmalıdır.*

Uygun limitler ifadesi iki türlü yorumlanabilir:

- Bir sistem, taban durundan uzaklaştıkça, yani problemin kuantum sayısı büyüdükçe $(n \to \infty)$, klasik mekaniğin uygulanabileceği hale gelir. Bir örnek olmak üzere, harmonik salınıcının klasik ve kuantum olasılık yoğunluğunu karşılaştıralım.

  Konumu $x = A\sin\omega t$ ifadesiyle verilen bir klasik salınıcının denge konumundan x uzaklıkta bir dx aralığında bulunma olasılığı $P(x)dx$ olsun. Salınıcının bu dx aralığında harcadığı zamana dt dersek, T periyodu cinsinden

$$P(x)\,dx = \frac{dt}{T} = \frac{\omega dt}{2\pi}$$

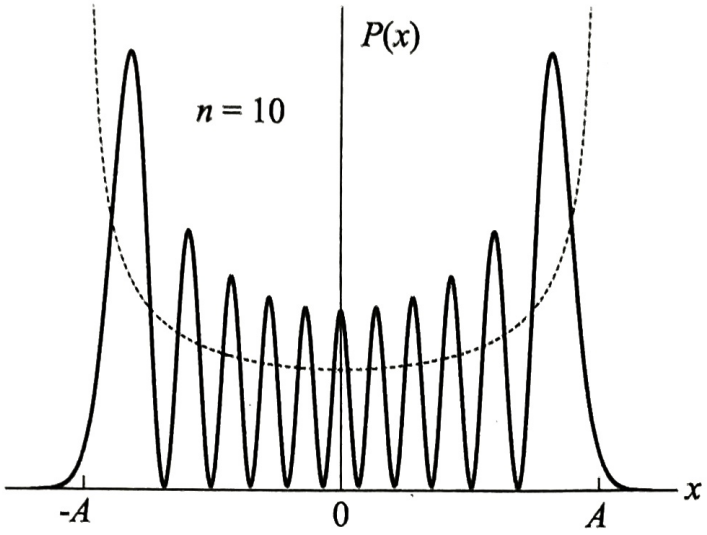
olur. dt diferansiyeli yerine dx yazabilmek için hareket denklemi kullanılırsa

$$\begin{aligned} dx &= \omega A \cos \omega t \, dt \\ \omega \, dt &= \frac{dx}{A \cos \omega t} = \frac{dx}{\sqrt{A^2 - A^2 \sin^2 \omega t}} = \frac{dx}{\sqrt{A^2 - x^2}} \\ P(x)\, dx &= \frac{dx}{2\pi \sqrt{A^2 - x^2}} \end{aligned}$$

bulunur. Bu ifade $[-A, A]$ aralığında x değişkenine göre normlanırsa

$$P(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{A^2 - x^2}}$$

bulunur. Şekil 4.14 de bu klasik olasılık yoğunluğu $n = 10$ kuantum sayılı $|\psi_n(x)|^2$ olasılık yoğunluğu ile karşılaştırılmıştır. Klasik eğrinin kuantum eğrisinin ortalama değeriyle uyum içinde olduğu görülmektedir.



Şekil 4.14: $n = 10$ durumunda olasılık yoğunluğu ve klasik karşılığı (kesikli çizgi).

- Kuantum mekaniğiyle ortaya çıkan Planck sabiti $\hbar$ klasik mekanikte olmayan bir büyüklüktür. Zaten küçük olan bu sabit $\hbar \to 0$ limitine gittiğinde klasik sonuçları bulmamız gerekir. Bir örnek olmak üzere, tünel olayında bulduğumuz

$$T \simeq e^{-2\alpha a}$$

geçiş olasılığına bakalım. Burada $\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ sabitinde $\hbar \to 0$ alınırsa $\alpha \to \infty$ ve $T \to 0$ olur, yani klasik olarak tünel olayı yoktur.

4.6 PERİYODİK POTANSİYEL – BANT TEORİSİ

Katıhal Fiziğinde yarıiletken maddelerin iletkenlik özellikleri önemli bir yer tutar. Silisyum ve germanyum gibi bazı yalıtkan maddeler belli sıcaklıklardan sonra iletken

olurlar. Bu özellik elektron enerji düzeylerinin bant yapısından kaynaklanır. Elektronun alabileceği enerjiler sürekli bantlar ve bunlar arasındaki yasak bölgelerden oluşur.

Katıların bant yapısını klasik olarak açıklamak mümkün değildir. Tamamen kuantum etkilerden kaynaklanan bu yapı, katı içindeki iyonların periyodik olarak dizildiği bir potansiyel kuyusunda bulunan elektronların enerji düzeyleri hesaplanarak görülebilir. Burada katıların bant yapısını kuantumsal olarak açıklayacağız. Matematiksel zorlukları en aza indirmek amacıyla, Dirac delta fonksiyonu şeklindeki bir potansiyel kuyusunu ele alacağız. Fiziksel olayı gördükten sonra, daha karmaşık potansiyeller için aynı hesap yapılabilir.

Dirac Delta Potansiyel Kuyusu

Önce, Dirac delta fonksiyonu şeklinde bir potansiyel kuyusu içindeki bir parçacığın $E > 0$ olan serbest çözümlerini bulalım. $x = 0$ noktasında bulunan $V(x) = -\alpha\delta(x)$ şeklinde bir potansiyel kuyusu için Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha\delta(x)\,\psi(x) = E\psi(x) \tag{4.12}$$

olup, burada α delta fonksiyonunun bir tür şiddeti olur.

$x \neq 0$ için $\delta(x) = 0$ olacağından,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x)$$

denkleminin, orijin dışındaki çözümleri,

$$\begin{aligned} x < 0 \text{ için:} \quad & \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ x > 0 \text{ için:} \quad & \psi(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \end{aligned} \tag{4.13}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{4.14}$$

olur. Katsayıları bulmak için, $x = 0$ daki süreklilik koşullarını kullanırız. Dalga fonksiyonlarının $x = 0$ da sürekli olması için,

$$A + B = C + D \tag{4.15}$$

olmalıdır.

Diğer koşul olarak 1. türeve bakılır. Bölüm 3 de dalga fonksiyonu ve onun birinci türevinin süreklilik koşullarını incelemiştik (bkz. Sayfa 46). Buna göre, potansiyel sonsuz sıçrama yapıyorsa, 1. türev sonlu bir sıçrama yapar. Bunun miktarını bulmak için, Denklem 4.6 nin $x = 0$ civarında küçük bir $[-\varepsilon, \varepsilon]$ aralığında integralini alalım:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\frac{d^2\psi}{dx^2}\,dx - \alpha\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\delta(x)\,\psi(x)\,dx = E\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\psi(x)\,dx$$

Soldaki birinci integral $(d\psi/dx)$ türevi demektir. İkinci integral, Dirac delta fonksiyonunun tanımından, $\psi(x)$ fonksiyonunun $x = 0$ daki değerini verir. Sağ taraftaki integral,

$\psi(x)$ sürekli olduğundan, $\varepsilon \to 0$ limitinde sıfıra gider. Buna göre,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{+\varepsilon} - \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{-\varepsilon}\right\} - \alpha\psi(0) = 0$$

olup, birinci türevin sağlaması gereken koşul bulunmuş olur:

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{+\varepsilon} - \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{-\varepsilon} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0) \tag{4.16}$$

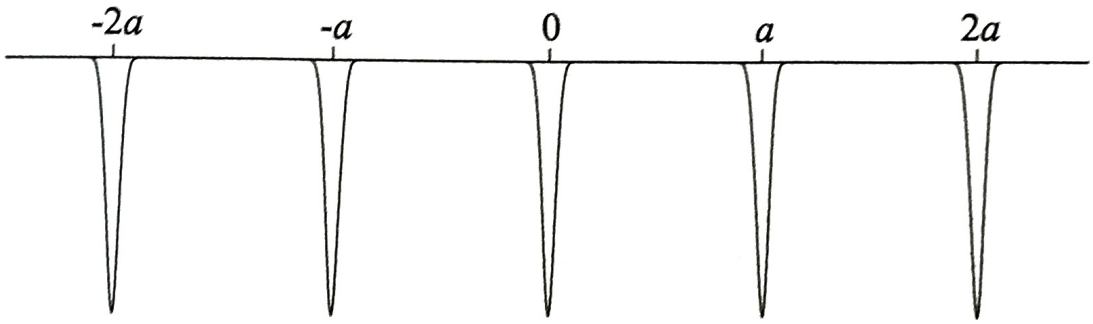
Bu yöntem, başka potansiyeller için de, dalga fonksiyonunun 1. türevinin yaptığı sıçramayı belirlemekte kullanılır. Bu sonuca göre, Denklem 4.13 deki dalga fonksiyonlarının 1. türevlerini hesaplayıp, $\varepsilon \to 0$ limitini alırsak,

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{-\varepsilon} = ik\left(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}\right) = ik(A-B)$$
$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{+\varepsilon} = ik\left(Ce^{ikx} - De^{-ikx}\right) = ik(C-D)$$

ve $\psi(0) = A + B$ değeriyle birlikte Denklem 4.16 de kullanırsak,

$$ik(C - D - A + B) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A+B) \tag{4.17}$$

bulunur. Buradan giderek, A, B, C, D katsayılarının oranları hesaplanır ve yansıma, geçme katsayıları tayin edilebilirler. Fakat biz bu hesabı sonuna kadar götürmeyip, doğrudan periyodik olarak dizilmiş Delta potansiyellerine geçeceğiz.

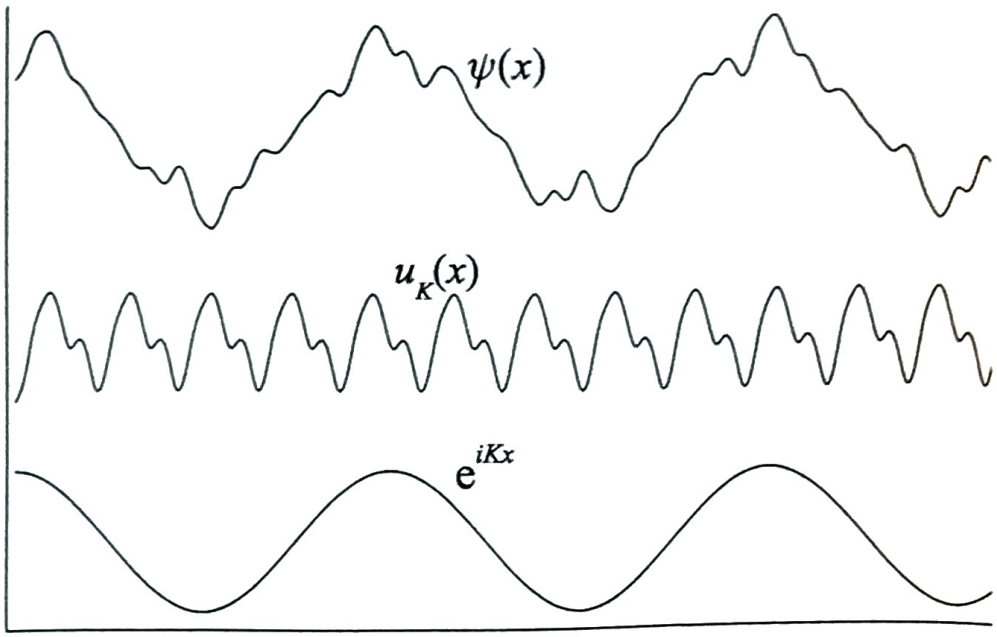


Şekil 4.15: Delta fonksiyonlarından oluşan periyodik potansiyel.

Periyodik Delta potansiyeli

Şekil 4.15 de görüldüğü gibi, $x = 0, \pm a, \pm 2a, \cdots$ konumlarında bulunan iyonların Dirac delta fonksiyonları yapısında bir potansiyel oluşturduğunu düşünelim:

$$V(x) = -\alpha \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - na) \tag{4.18}$$



Şekil 4.16: Bloch teoremi. $\psi(x)$ dalga fonksiyonu daima, periodik bir $u_K(x)$ fonksiyonu ve onun zarfı olan $\exp(iKx)$ düzlem dalgasının çarpımı olarak ifade edilebilir.

Bu potansiyel fonksiyonunda hareket eden bir elektronun enerji düzeylerini bulmak istiyoruz. Bu potansiyelin periyodik oluşu önemli bir teoreme yolaçar:

Bloch teoremi: *Bir potansiyel, $V(x+a)=V(x)$ şeklinde periyodik ise, dalga fonksiyonları daima,*

$$\psi(x) = e^{iKx}\, u_K(x) \qquad (K \text{ reel}) \tag{4.19}$$

şeklinde, bir düzlem dalgayla modüle edilmiş periyodik bir u_K fonksiyonu olarak ifade edilebilirler:

$$u_K(x+a) = u_K(x) \tag{4.20}$$

Bu teoremin ispatı ileri düzeyde kitaplarda bulunabilir. Teorem şöyle bir kolaylık sağlar: Schrödinger denkleminin $[0,a]$ aralığındaki $\psi(x)$ çözümü bulunursa, bu çözüm Bloch teoremiyle diğer bölgelere de kolayca şöyle taşınabilir:

$$\begin{aligned} \psi(x+a) &= e^{iK(x+a)}\, u_K(x+a) = e^{iKa}\, e^{iKx}\, u_K(x) \\ \psi(x+a) &= e^{iKa}\, \psi(x) \end{aligned} \tag{4.21}$$

Dikkat edilirse, $\psi(x)$ dalga fonksiyonu periyodik değildir, fakat olasılık yoğunluğu (mutlak değer karesi) yine de periyodik olur:

$$|\psi(x+a)|^2 = \left|e^{iKa}\,\psi(x)\right|^2 = \underbrace{\left|e^{iKa}\right|^2}_{1} \left|\psi(x)\right|^2 = |\psi(x)|^2 \tag{4.22}$$

Dalga Fonksiyonu Hesabı

Şimdi $0 < x < a$ aralığındaki $\psi(x)$ çözümünü bulalım. Bu bölgede potansiyel sıfır olduğu için,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x)$$

denkleminin $E > 0$ enerjili çözümleri doğrudan yazılabilir:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad (0 < x < a \text{ için}) \\ k^2 &= \frac{2mE}{\hbar^2} \end{aligned} \tag{4.23}$$

Şimdi, $a < x < 2a$ aralığındaki dalga fonksiyonunu yazmak istersek, Denklem 4.21 bağıntısından yararlanırız:

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x) &= e^{iKa}\psi_I(x-a) \\ \psi_{II}(x) &= e^{iKa}\left[Ae^{ik(x-a)} + Be^{-ik(x-a)}\right] \qquad (a < x < 2a \text{ için}) \end{aligned} \tag{4.24}$$

(Dikkat edilirse, buradaki x değeri $a < x < 2a$ aralığında olduğu için, bir önceki bölgedeki dalga fonksiyonunu $x - a$ daki değeriyle kullanmak gerekir.)

Şimdi, $x = a$ daki sınır koşullarını kullanalım. Birinci koşul, dalga fonksiyonunun $x = a$ da sürekli olmasıdır:

$$\begin{aligned} \psi_I(a) &= \psi_{II}(a) \\ Ae^{ika} + Be^{-ika} &= e^{iKa}(A+B) \end{aligned} \tag{4.25}$$

Diğer koşul, birinci türevin $x = a$ da sonlu bir sıçrama yapmasıdır. Bunun ne kadar olacağını Denklem 4.16 de bulmuştuk:

$$\psi'_{II}(a) - \psi'_I(a) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(a)$$

Her iki bölgedeki çözümlerin (Denklem 4.23 ve 4.24) birinci türevleri hesaplanıp bu ifadede yerine konursa,

$$ike^{iKa}(A-B) - ik\left(Ae^{ika} - Be^{-ika}\right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\left(Ae^{ika} + Be^{-ika}\right) \tag{4.26}$$

Bu iki sınır koşulu (Denklem 4.25 ve 4.26) A ve B katsayıları için lineer bir denklem sistemi olur. Katsayılar yeniden düzenlenirse,

$$\begin{aligned} \left(e^{ika} - e^{iKa}\right)A + \left(e^{-ika} - e^{iKa}\right)B &= 0 \\ \left[-ik\left(e^{ika} - e^{iKa}\right) + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}e^{ika}\right]A + \left[ik\left(e^{-ika} - e^{iKa}\right) + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}e^{-ika}\right]B &= 0 \end{aligned}$$

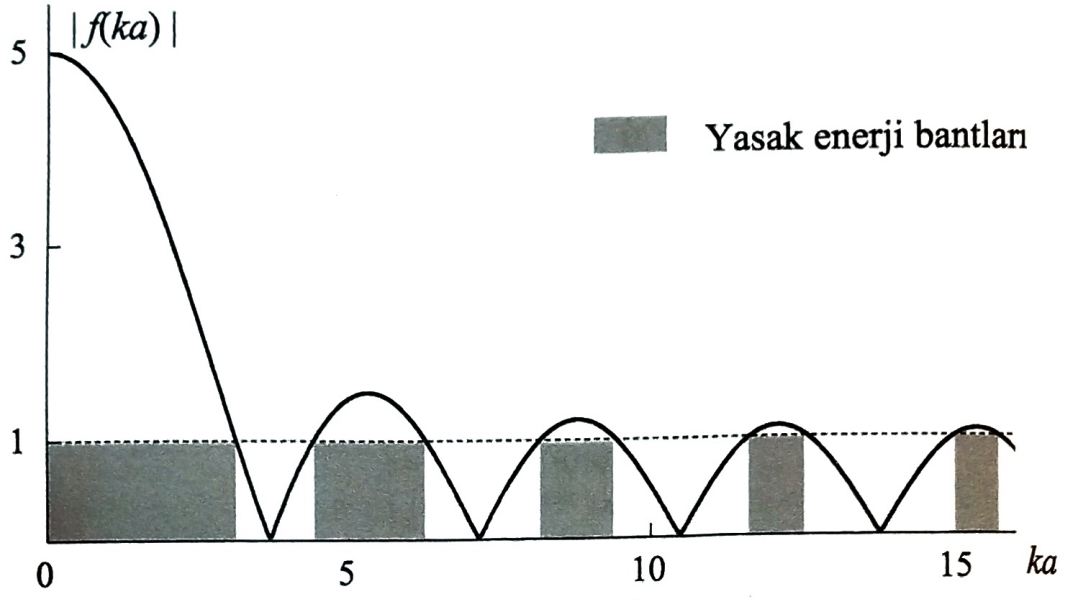
Bu denklem sisteminin sıfırdan farklı çözümü olması için katsayılar determinantı sıfır olmalıdır. Hesap sonucu,

$$4ie^{iKa}\left[k(\cos Ka - \cos ka) + \frac{m\alpha}{\hbar^2}\sin ka\right] = 0$$

bulunur. Yine, bu eşitliğin her zaman sıfır olabilmesi için, parantez içindeki ifade sıfır olmalıdır. Buradan enerji özdeğerleri için kullanacağımız ifade bulunmuş olur:

$$\boxed{\cos Ka = \cos ka - \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \sin ka} \tag{4.27}$$

Bu denklemin sol tarafındaki K parametresi katıhal fiziğinde kristal momentumu olarak bilinir. Fakat biz onu Bloch teoremiyle gelen bir parametre olarak görüp, fiziksel yorumuna girmeyeceğiz.



Şekil 4.17: Enerji bantları.

Enerji bantları

Şimdi enerjinin hangi değerleri alabileceğine bakalım. E enerjisi k dalgasayısı aracılığıyla bulunur:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad \rightarrow \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

k dalgasayısı Denklem 4.27 nin sadece sağ tarafında yer almaktadır. Sol tarafta ise, katı cismin örgü yapısına bağlı bir K sabiti bulunmaktadır. Bu K sabiti ne olursa olsun, $|\cos Ka| \leq 1$ olacağından, eşitliğin sağ tarafı da 1 den küçük olmak zorundadır:

$$\left| \cos ka - \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \right) \sin ka \right| \leq 1 \tag{4.28}$$

Bu eşitsizlikteki fonksiyonu $f(ka)$ ile gösterip, mutlak değerini ka ya bağlı olarak Şekil 4.17 de gösteriyoruz. (Grafikte $m\alpha a/\hbar^2 = 6$ sayısal değeri kullanılmıştır.) Görüldüğü gibi, $|f(ka)| > 1$ olan bölgelerde (şekilde taralı yerlerde) Denklem 4.28 eşitsizliği sağlanamaz, fonksiyonun değeri 1 den büyük olur. Bunun dışında kalan bölgelerde ka her değeri alabilir ve böylece bir enerji bant yapısı oluşur. Enerji arttıkça bant genişliği azalmaktadır.

Bu inceleme başka periyodik potansiyeller için de yapılabilirdi. Örneğin, kare kuyu için yine Denklem 4.27 benzeri, fakat daha karmaşık bir eşitsizlik edilebilmektedir.

PROBLEMLER

4.1 *100 V luk bir potansiyel farkı altında hızlandırılan bir elektron demeti 50 eV luk bir basamak potansiyeline gönderiliyor. Yansıyan ve geçen elektronların yüzdesini bulun.*

4.2 *100 eV enerjili bir elektron demeti yüksekliği 110 eV ve genişliği $a = 1$ Å olan bir potansiyel engeline rastlıyor. Tünelleme olasılığını hesaplayın.*

4.3 $[0,a]$ *aralığındaki sonsuz kuyuda bir parçacığın $n = 3$ kuantum sayılı durumda olduğu biliniyor. (a) Bu parçacığın konumunun $[0,a/3]$ arasında olma olasılığının $1/3$ olduğunu gösterin. (b) Genel olarak, bir n durumundaki parçacığın $[0,a/n]$ arasında bulunma olasılığının $1/n$ olduğunu gösterin.*

4.4 *(a) Sonsuz kuyu potansiyelinde E_n ve E_{n+1} gibi ardışık iki enerji düzeyi arasındaki bağıl farkın*

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2}$$

olduğunu gösterin. (b) Bağıl farkın klasik limitini bulun ve yorumlayın.

4.5 $[0,a]$ *aralığındaki sonsuz kuyu potansiyelinde n kuantum sayılı bir özdurumda*

$$\Delta x^2 = < x^2 > - < x >^2 = \frac{a^2}{12}\left(1 - \frac{6}{n^2\pi^2}\right)$$

olduğunu gösterin.

4.6 *Aşağıda verilen $V(x)$ potansiyelleri için Schrödinger denklemini boyutsuz hale getirin:*

$$\text{(a)} \qquad V(x) = -ax$$

$$\text{(b)} \qquad V(x) = \frac{V_0}{\cos^2 ax}$$

$$\text{(c)} \qquad V(x) = -\frac{V_0}{1+e^{ax}}$$

4.7 *Tek boyutlu problemlerde bağlı enerjili durumların dalga fonksiyonlarının daima reel olarak seçilebileceğini gösterin.*

4.8 *Çift basamak potansiyeli*

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 5V_0 & 0 < x < a \\ 8V_0 & a < x \end{cases}$$

olarak veriliyor. (a) $E = 9V_0$ enerjili bir parçacığın geçiş ve yansıma katsayılarını a parametresi cinsinden bulun. (b) Hangi a değerlerinde geçiş katsayısı maksimum olur?

4.9 *Yarı sonsuz kuyu potansiyeli*

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ -V_0 & 0 < x < a \\ 0 & a < x \end{cases}$$

*için bağlı durum ($E < 0$) enerjilerini bulun. (*Yol gösterme: *Metinde bulunan sonsuz kuyu çözümlerinden yararlanmak yeterlidir.)*

4.10 *Asimetrik potansiyel kuyusu*

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & x < 0 \\ 0 & 0 < x < a \\ V_2 & a < x \end{cases}$$

olarak veriliyor ($V_1 < V_2$). Parçacığın bağlı durumdaki enerjilerini veren ifadeyi bulun (çözmek gerekmez).

4.11 *Bir kare kuyudaki elektronun sadece iki tane bağlı durumu olabilmesi için kuyu derinliği V_0 ve yarı genişliği a arasında nasıl bir bağıntı olmalıdır?*

4.12 *Bir nötronla proton arasındaki çekici potansiyelin bir kare kuyu olduğunu varsayalım. Bu kare kuyunun genişliği $2a = 1$ fm olarak alınabilir. Bu sistemin bağlı durumu demek olan deuteron parçacığının bağlanma enerjisinin (serbest hale geçmesi için gerekli enerjinin) 2.23 MeV olduğu ve sistemin başka bağlı durumu olmadığı deneysel olarak gözlenmiştir. Bu kare kuyunun derinliğini hesaplayın (burada m kütlesi olarak $m_p = m_n = 940$ MeV alınabilir).*

4.13 *Diatomik moleküllerin küçük genlikli titreşimleri için*

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

harmonik salınıcı potansiyeli kullanılır. Tipik olarak $k \simeq 10^3\ J\ m^{-2}$ olur. (a) Diatomik moleküller için sıfır noktası enerjisini eV cinsinden hesaplayın. (b) Birinci uyarılmış durumdan taban durumuna geçişte yayınlanan radyasyonun frekansını ve dalgaboyunu hesaplayın. Bu dalganın hangi tür (mor ötesi, kızıl ötesi, görünür ışık bölgesi) olduğunu araştırın.

4.14 *Harmonik salınıcının bir n durumunda $< xp + px >$ beklenen değerini hesaplayın.*

4.15 *Bir metal yüzeye yakın elektronlar metal içinde harmonik salınıcı potansiyeli etkisi altındadırlar. Metal yüzey sonsuz bir duvar olarak düşünülebilir. Buna göre, potansiyel fonksiyonu*

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ \frac{1}{2}m\omega^2x^2 & x > 0 \end{cases}$$

olarak alınabilir. (a) Bu sistemin en küçük enerjili üç durumunun dalga fonksiyonunu ve enerjilerini yazın (harmonik salınıcı çözümlerinden yararlanın). (b) $n = 1$ için konumun ve momentumun beklenen değerlerini bulun.

4.16 *Taban durumundaki bir harmonik salınıcı klasik olarak ele alındığında ancak $E_0 = \frac{1}{2}m\omega^2A^2$ olan $[-A, +A]$ aralığında bulunabilir (klasik dönüm noktaları). Aynı durumdaki kuantal salınıcının klasik dönüm noktaları dışında bulunma olasılığının %16 civarında olduğunu gösterin.*

BÖLÜM 5

KUANTUM MEKANİĞİNİN GENEL FORMALİZMİ

Bölüm 4 de, tek boyutlu potansiyellerde Schrödinger denkleminin çözümleri için çeşitli yöntemler kullanıldı ve klasik karşılığı olmayan bazı sonuçlar elde edildi. Şimdi, bu deneyimin ışığında, özel matematiksel yöntemlerin ötesine bakıp, kuantum mekaniğinin altında yatan genel formalizmi görmeye çalışalım. Bu sayede değişik kuantum sistemlerin ortak yönleri açığa çıkmış olacak ve daha karmaşık problemlere (üç boyutlu potansiyeller, spin açısal momentumu,...) daha bir sistematik yaklaşım sağlanabilecektir.

5.1 DALGA FONKSİYONU UZAYI

Bir kuantum sistemin fiziksel durumunu temsil eden dalga fonksiyonları matematikte özel bir fonksiyon uzayı oluştururlar. Bu *sonsuz boyutlu bir lineer vektör uzayıdır*. Bu vektör uzayı bildiklerimizden biraz farklı olduğu için, daha iyi anlaşılması amacıyla, 3-boyutlu vektör uzayıyla karşılıklı olarak tanımlamaya çalışalım.

3-boyutlu kartezyen kordinatlarda tanımlanan vektör uzayının özelliklerini hatırlayalım:

1. Bu uzayda bir $\vec{u}$ vektörü, eksenler boyunca u_x, u_y, u_z gibi üç bileşeni verildiğinde tanımlanmış olur. Bu bileşenleri u_1, u_2, u_3 gibi sıralarsak

$$\vec{u} = (u_1, u_2, u_3) = \{u_i\} \qquad (i = 1,2,3)$$

yazılabilir.

2. Bu uzaydaki $\vec{u}$ ve $\vec{v}$ gibi iki vektörün $a\vec{u} + b\vec{v}$ gibi her lineer kombinasyonu da yine bu uzaya ait bir vektördür. Yani, bu bir *lineer vektör uzayıdır*.

3. Bu uzaydaki vektörler için bir *skaler çarpım* tanımlıdır. Bu çarpımı $(\vec{u},\vec{v})$ ile gösterirsek

$$(\vec{u},\vec{v}) = \vec{u}.\vec{v} = u_1v_1 + u_2v_2 + u_3v_3 = \sum_{i=1}^{3} u_iv_i$$

olur. Özel olarak, bir vektörün *normu* $\|u\|^2 = (u,u)$ skaler çarpımıyla tanımlanır.

4. Eksenler boyunca seçilen $(\hat{e}_1,\hat{e}_2,\hat{e}_3)$ baz vektörlerini hatırlayalım (bu vektörler $\hat{i},\hat{j},\hat{k}$ olarak da gösterilirler): Bu vektörlerin normları bire eşit ve birbirlerine diktirler:

$$(\hat{e}_i,\hat{e}_j) = \hat{e}_i.\hat{e}_j = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

Bu uzayda her $\vec{A}$ vektörü bu baz vektörleri cinsinden

$$\vec{A} = A_1\hat{e}_1 + A_2\hat{e}_2 + A_3\hat{e}_3$$

olarak yazılabilir. Buradaki A_1,A_2,A_3 reel sayıları $\vec{A}$ vektörünün bileşenleri olur:

$$A_i = \hat{e}_i.\vec{A} = (\hat{e}_i,\vec{A})$$

Şimdi aynı yolu izleyerek dalga fonksiyonlarının oluşturduğu uzayı tanımlayalım.

1. Bu bir sonsuz boyutlu vektör uzayıdır. Bir vektör (yani, dalga fonksiyonu ψ) uzayın her $\vec{r}$ konumunda değeri verilmekle tanımlanmış olur. $\vec{r}$ konumu sonsuz sayıda değer alabildiği için dalga fonksiyonu uzayının boyutu sonsuzdur. Başka bir deyişle, 3-boyutlu uzayda $i = 1,2,3$ gibi üç tane değer alabilen i indisi yerine, sürekli değişebilen $\vec{r}$ indisi vardır:

$$\{u_i\} \longrightarrow \psi(\vec{r})$$

2. Bu kompleks bir lineer uzaydır: ψ_1 ve ψ_2 gibi iki vektörün kompleks katsayılı $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ gibi her lineer kombinasyonu da bu uzayın bir vektörüdür (süperpozisyon özelliği).

3. Bu uzayda bir skaler çarpım tanımlanabilir: $\psi(\vec{r})$ ve $\phi(\vec{r})$ gibi iki dalga fonksiyonu için yazılan

$$(\psi,\phi) = \int_V d^3r\, \psi^*(\vec{r})\, \phi(\vec{r}) \tag{5.1}$$

ifadesi, ϕ ile ψ vektörlerinin skaler çarpımı olarak tanımlanır (burada ϕ^* kompleks eşlenik olur). Özel olarak,

$$\| \psi \|^2 = (\psi,\psi) = \int_V d^3r\, \psi^*(r)\, \psi(\vec{r}) \tag{5.2}$$

ψ vektörünün normudur. Norm reel ve pozitif bir sayı olur: $(\psi,\psi) \geq 0$. Norm sıfırsa, vektörün kendisi sıfır olmak zorundadır. Ancak normu sonlu dalga fonksiyonları bu uzayın elemanları olurlar.

Skaler çarpımın 3 boyutta bilinen özellikleri dalga fonksiyonu uzayında da geçerlidir; ancak bazı bağıntılar, uzayın kompleks olması nedeniyle, biraz değişik olurlar:

(i) $(\phi, \psi) = (\psi, \phi)^*$

(ii) $(\phi, c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(\phi, \psi_1) + c_2(\phi, \psi)$

(iii) $(c_1\phi_1 + c_2\phi_2, \psi) = c_1^*(\phi_1, \psi) + c_2^*(\phi_2, \psi)$

4. Dalga fonksiyonu uzayında $u_1(\vec{r}), u_2(\vec{r}), u_3(\vec{r}), \ldots$ gibi bir i indisiyle sıralanabilen bir $\{u_i(\vec{r})\}$ fonksiyonları kümesinin var olduğunu düşünelim ($i = 1,2,3,\ldots N$). Buradaki N sayısı sonlu veya sonsuz olabilir. Bu küme elemanlarının birbirleriyle skaler çarpımları

$$(u_i, u_j) = \int_V d^3r\, u_i^*(\vec{r})\, u_j(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

oluyorsa, $\{u_i\}$ kümesi *ortonormal* (normu 1 ve birbirine dik) bir kümedir denir. Bu uzayda her $\psi(\vec{r})$ fonksiyonu, bu küme elemanları cinsinden

$$\boxed{\psi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N} c_i u_i(\vec{r})} \tag{5.3}$$

açılabiliyorsa $\{u_i\}$ kümesi, dalga fonksiyonu uzayında bir *ortonormal baz* oluşturuyor denir. $\{u_i\}$ fonksiyonları *baz vektörleri*, $\{c_i\}$ katsayıları ise ψ vektörünün bu bazdaki *bileşenleri* olurlar. Bileşenler

$$c_i = (u_i, \psi) = \int_V d^3r\, u_i^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r}) \qquad (i = 1,2,\ldots N) \tag{5.4}$$

bağıntılarıyla bulunabilir. Seçilen bir $\{u_i\}$ bazındaki $\{c_i\}$ bileşenleri verilmekle bir dalga fonksiyonu tamamen belirlenmiş olur.

Matematikte bu özelliklere sahip (sonsuz boyutlu, kompleks, lineer, bir skaler çarpım tanımlanabilen ve normu sonlu olan fonksiyonların oluşturduğu) uzaya *Hilbert Uzayı* adı verilir.

Niçin bu vektör uzayı, baz vektörleri,... vs. gibi kavramlarla uğraşıyoruz? Daha sonra, üç boyutlu problemlerde ve spin kavramında görüleceği üzere, karmaşık problemleri çözebilmekte bu formalizm büyük kolaylık sağlar. Bu aşamada şunu söyleyebiliriz: Fiziksel büyüklükleri hesaplamakta ψ dalga fonksiyonunun integralleri, türevleri, vs. ile uğraşmaktansa cebirsel c_i katsayılarıyla uğraşmak daha kolaydır. Örneğin, skaler çarpım ifadesi (5.1)

$$(\psi, \phi) = \left(\sum_i c_i u_i, \sum_j d_j u_j\right) = \sum_i \sum_j c_i^* d_j (u_i, u_j) = \sum_i \sum_j c_i^* d_j \delta_{ij} = \sum_i c_i^* d_i$$

ve norm ifadesi (5.2)

$$(\psi, \psi) = \sum_i |c_i|^2$$

şeklinde cebirsel sayıların çarpım ve toplamları olarak yazılabilirler.

5.1.1 KAPALILIK BAĞINTISI

Verilen bir ortonormal $\{u_i\}$ kümesinin bir baz oluşturup oluşturmadığı nasıl anlaşılır? Yine ψ dalga fonksiyonunu bir $\{u_i\}$ bazında yazalım:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) \qquad \text{ve} \qquad c_i = (u_i, \psi) = \int_V d^3r'\, u_i^*(\vec{r}\,')\, \psi(\vec{r}\,')$$

(daha sonra karışıklığa yol açmaması için ikinci ifadede $\vec{r}\,'$ kullanıldı). Bu c_i ifadesi, yerine konur ve toplama ile integral yer değiştirilirse

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i \int_V d^3r' u_i^*(\vec{r}\,')\, \psi(\vec{r}\,')\, u_i(\vec{r}) = \int_V d^3r'\, \psi(\vec{r}\,') \left[\sum_i u_i^*(\vec{r}\,') u_i(\vec{r})\right]$$

Bu eşitliğin doğru olabilmesi için parantez içindeki ifade 3-boyutlu Dirac delta fonksiyonuna eşit olmalıdır:

$$\boxed{\left[\sum_i u_i^*(\vec{r}\,') u_i(\vec{r})\right] = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}\,')} \tag{5.5}$$

Kapalılık bağıntısı denilen bu ifade, bir kümenin baz olup olmadığının kriteridir. Karşıt teorem olarak, *kapalılık bağıntısını sağlayan her $\{u_i\}$ kümesinin bir baz oluşturduğu* ispatlanabilir.

Dalga fonksiyonu uzayında bir baz vektörleri kümesi nasıl elde edilir? Bir sonraki kısımda görüleceği üzere, bazı tür operatörlerin özfonksiyonları her zaman ortonormal bir baz oluştururlar.

Alıştırma 5.1 : **Schwarz eşitsizliği.** *Dalga fonksiyonu uzayında ϕ ve ψ gibi iki vektör için*

$$|(\phi, \psi)|^2 \leq (\phi, \phi)(\psi, \psi)$$

olduğunu ispatlayın.

Çözüm : Kompleks bir c parametresi yardımıyla bu iki vektörün yeni bir lineer kombinasyonu olan $\phi + c\psi$ vektörünü oluşturalım. Bunun da normu pozitif ve reel olacağından

$$(\phi + c\psi, \phi + c\psi) \geq 0$$

olmalıdır. Bu ifade yukardaki kurallara göre açılırsa

$$(\phi, \phi) + c(\phi, \psi) + c^*(\psi, \phi) + c^* c(\psi, \psi) \geq 0$$

yazılabilir. Bu, her c değeri için geçerli olmalıdır. Özel olarak

$$c = -\frac{(\psi, \phi)}{(\psi, \psi)}$$

şeklinde seçilirse

$$c^* = -\frac{(\psi,\phi)^*}{(\psi,\psi)} = -\frac{(\phi,\psi)}{(\psi,\psi)} \qquad \text{ve} \qquad c^*c = |c|^2 = \frac{|(\psi,\phi)|^2}{(\psi,\psi)^2}$$

olur. Bu değerler norm ifadesinde yerine konur:

$$(\phi,\phi) - 2\frac{(\phi,\psi)(\psi,\phi)}{(\psi,\psi)} + \frac{|(\psi,\phi)|^2(\psi,\psi)}{(\psi,\psi)^2} \geq 0$$

$(\phi,\psi)(\psi,\phi) = (\phi,\psi)(\phi,\psi)^* = |(\phi,\psi)|^2$ olduğu gözönüne alınırsa, sadeleştirme sonucu

$$(\phi,\phi) - \frac{|(\phi,\psi)|^2}{(\psi,\psi)} \geq 0 \qquad \longrightarrow \qquad |(\phi,\psi)|^2 \leq (\phi,\phi)(\psi,\psi)$$

5.2 LİNEER OPERATÖRLERİN MATRİS TEMSİLİ

Bir $\hat{A}$ operatörü, dalga fonksiyonu uzayında her ψ vektörüne başka bir ψ' vektörü karşılık getirir:

$$\hat{A}\,\psi = \psi'$$

$\hat{A}$ operatörü lineer ise şu özelliği sağlar:

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(\hat{A}\psi_1) + c_2(\hat{A}\psi_2)$$

$\hat{A}$ operatörünü önce ψ vektörüne etki ettirip sonra ϕ vektörüyle skaler çarpımı alınır:

$$(\phi,\hat{A}\psi) = \int_V d^3r\, \phi^*(\vec{r})\, \hat{A}\psi(\vec{r}) \tag{5.6}$$

Elde edilen kompleks değerli $(\phi,\hat{A}\psi)$ sayısına $\hat{A}$ operatörünün ϕ ve ψ durumları arasındaki *matris elemanı* denir.

Fiziksel bir büyüklüğü temsil eden $\hat{A}$ operatörününün bir ψ durumuna etkisine tekrar bakalım:

$$\psi' = \hat{A}\psi$$

Bir ortonormal $\{u_i\}$ baz vektörleri kümesinde bu eşitliği yazarsak

$$\psi = \sum_j c_j u_j \qquad \text{ve} \qquad \psi' = \sum_k c'_k u_k$$

$$\sum_k c'_k u_k = \hat{A}\sum_j c_j u_j = \sum_j c_j(\hat{A}u_j)$$

Bu operatör eşitliğin iki tarafının bir u_i baz vektörü ile skaler çarpımı alındığında

$$\begin{aligned} \sum_k c'_k(u_i,u_k) &= \sum_j c_j(u_i,\hat{A}u_j) \\ \sum_k c'_k\delta_{ki} &= \sum_j c_j(u_i,\hat{A}u_j) \\ c'_i &= \sum_j (u_i,\hat{A}u_j)c_j \end{aligned}$$

bulunur.

Bu ifadeye bakıldığında, lineer cebirdeki bir matrisle bir sütun vektörünün çarpımı yapısı görülmektedir:

$$\begin{bmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \\ c'_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \cdots & A_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix}$$

Gerçekten de, *ψ ve ψ' dalga fonksiyonları yerine c_i ve c'_j sütun vektörleri, $\hat{A}$ operatörü yerine de $A_{ij} = (u_i, \hat{A}u_j)$ matris elemanları kullanmakla, aynı problemi bir $\{u_i\}$ bazında tamamen tanımlamış oluruz.* Kuantum mekaniği ilk kurulduğu ilk yıllarda, Schrödinger'in dalga fonksiyonu yaklaşımından az önce, Heisenberg tarafından bir *matris mekaniği* ortaya atılmış, kısa bir süre sonra da Schrödinger bunların eşdeğer olduğunu göstermişti. Bu eşdeğerlik burada da görülmektedir.

Lineer bir operatörün özdeğer problemini hatırlayalım. Eğer, $\hat{A}$ operatörünün bir ψ dalga fonksiyonuna etkisi sonucu bulunan durum yine ψ durumu ile orantılı ise

$$\hat{A}\psi(\vec{r}) = \lambda\psi(\vec{r})$$

ψ dalga fonksiyonu $\hat{A}$ operatörünün *özvektörü*, λ kompleks sayısı ise *özdeğeri* olur.

Şimdi, özdeğer problemine bir $\{u_i\}$ bazında bakalım. Böyle bir bazda ψ özvektörü $\psi(\vec{r}) = \sum_j c_j u_j(\vec{r})$ şeklinde açılırsa, özdeğer denklemi

$$\hat{A}\psi = \sum_j c_j \hat{A}u_j = \lambda \sum_j c_j u_j$$

olur. Bu ifadenin u_i vektörüyle skaler çarpımı alınırsa

$$\sum_j c_j (u_i, \hat{A}u_j) = \lambda \sum_j c_j (u_i, u_j)$$

olur. Ortonormal bir baz için $(u_i, u_j) = \delta_{ij}$ olduğundan

$$\sum_j c_j (u_i, \hat{A}u_j) = \lambda \sum_j c_j \delta_{ij} = \lambda c_i$$

bulunur. Eşitliğin sol tarafında $\hat{A}$ operatörünün u_i ve u_j durumları arasındaki matris elemanı görülmektedir. Bunu A_{ij} ile gösterirsek

$$\sum_j c_j A_{ij} = \lambda c_i \qquad (i = 1, 2, \ldots N) \tag{5.7}$$

Bu ifade, N sayıda c_i bilinmeyeni içeren N tane lineer denklemi temsil eder. Daha açık yazarsak

$$\begin{aligned} (A_{11} - \lambda)c_1 + A_{12}c_2 + \cdots + A_{1N}c_N &= 0 \\ A_{21}c_1 + (A_{22} - \lambda)c_2 + \cdots + A_{2N}c_N &= 0 \\ \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad &= \vdots \\ A_{N1}c_1 + A_{N2}c_2 + \cdots + (A_{NN} - \lambda)c_N &= 0 \end{aligned}$$

Bu lineer homojen denklem sisteminin çözümü olabilmesi için katsayılar determinantı sıfır olmalıdır:

$$\det \begin{vmatrix} A_{11}-\lambda & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22}-\lambda & \dots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \dots & A_{NN}-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

Bu ifade λ bilinmeyeni cinsinden N. dereceden bir polinom denklemidir:

$$\lambda^N + a_1\lambda^{N-1} + \cdots + a_{N-1}\lambda + a_N = 0$$

Bu denklemin kökleri $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)$ $\hat{A}$ operatörünün özdeğerleri olur. Herbir λ_i özdeğeri için yukardaki denklem sistemi çözülerek $c_j^{(i)}$ katsayıları bulunur ve ψ_i özvektörü $\psi_i = \sum_j c_j^{(i)} u_j$ şeklinde oluşturulabilir.

Alıştırma 5.2: *İki boyutlu bir bazda bir $\hat{A}$ operatörünün matris temsili*

$$A = \begin{pmatrix} 3 & i \\ -i & 3 \end{pmatrix}$$

olarak veriliyor. Bu operatörün özdeğer ve özvektörlerini bulun.

Çözüm : λ özdeğerlerini veren determinant bu matris cinsinden

$$\det \begin{vmatrix} 3-\lambda & i \\ -i & 3-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

olarak yazılır. Bu bir 2. derece polinomu olarak yazılırsa

$$\begin{aligned} (3-\lambda)^2 + (i)^2 &= 0 \\ \lambda^2 - 6\lambda + 8 &= 0 \end{aligned}$$

kökler $\lambda_1 = 2$ ve $\lambda_2 = 4$ olurlar. Bulunmak istenen özvektör bir sütun matrisi olarak yazılırsa

$$\begin{pmatrix} 3 & i \\ -i & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 3-\lambda & i \\ -i & 3-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

Önce $\lambda = 2$, daha sonra $\lambda = 4$ alınıp herbir özvektör için c_1 ve c_2 bileşenleri bulunur:

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \psi_2 = \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}$$

Bu özvektörler normlanmak istenirse $\sqrt{|c_1|^2 + |c_2|^2}$ ile bölünür:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}$$

5.2.1 HERMİTİK OPERATÖRLER

Her $\hat{A}$ operatörü için $\hat{A}^\dagger$ ile gösterilen bir *hermitik eşlenik* operatör skaler çarpım yoluyla şöyle tanımlanır:

$$(\phi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^\dagger\phi, \psi)$$
$$\int d^3r\, \phi^*\, (\hat{A}\psi) = \int d^3r\, (\hat{A}^\dagger\phi)^*\, \psi$$

daha açık bir deyişle, $\hat{A}$ nın ψ ye etkisi ile, hermitik eşleniğinin ϕ ye etkisi aynı matris elemanını vermelidir.

Hermitik eşlenik alma işleminin özelliklerini şöyle sıralayabiliriz:

(i) $(c\hat{A})^\dagger = c^*\hat{A}^\dagger$ (c kompleks bir sayı)

(ii) $(\hat{A}+\hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$

(iii) $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$

(iv) $(\hat{A}\,\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\,\hat{A}^\dagger$

Bu özellikler yukardaki tanımda kullanılarak ispatlanabilirler. Örneğin, (iv) özelliğini ispatlamak üzere tanımdan yararlanalım:

$$\left((\hat{A}\hat{B})^\dagger\phi, \psi\right) = (\phi, \hat{A}\hat{B}\psi)$$

Eşitliğin sağ tarafındaki $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ operatörleri için yine tanım ifadesini ayrı ayrı uygulayıp soldaki ϕ üzerine etki ettirelim:

$$\left((\hat{A}\hat{B})^\dagger\phi, \psi\right) = (\hat{A}^\dagger\phi, \hat{B}\psi) = (\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger\phi, \psi)$$

Bu sonuca göre (iv) eşitliği doğrudur.

Bir operatörün hermitik eşleniği kendisine eşitse *hermitik operatör* adını alır.

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \tag{5.8}$$

veya, yukardaki tanıma göre

$$(\hat{A}\phi, \psi) = (\phi, \hat{A}\psi) \tag{5.9}$$

olup, skaler çarpımda iki vektöre de etkisi aynıdır.

Konum operatörü $\vec{r}$ nin hermitik olduğu açıktır: skaler çarpım içinde ψ veya ϕ ye etki ediyor şekilde yazılırsa bir şey değişmez.

Momentum operatörü $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ nin hermitik olduğunu tek boyutlu uzayda gösterelim:

$$(\phi, \hat{p}\psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \phi^*(x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\psi(x) = -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \phi^*(x)\frac{d\psi}{dx}$$

kısmi integrasyon formülü $\int u\, dv = uv - \int v\, du$ bağıntısına göre

$$(\phi, \hat{p}\psi) = -i\hbar\Big[\phi^*\psi\Big]_{-\infty}^{+\infty} + i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \frac{d\phi^*}{dx}\psi$$

yazılabilir. $x = \pm\infty$ da her dalga fonksiyonu sıfır olacağından, sağ taraftaki 1.terim sıfır olur. Kalan terimde $i = (-i)^*$ olduğu gözönüne alınırsa

$$(\phi,\hat{p}\psi)=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\left[-i\hbar\frac{d\phi}{dx}\right]^{*}\psi=(p\phi,\psi)$$

yazılabilir ki bu, p nin hermitik olması demektir.

Aynı yöntemle xp_x veya $\vec{r}.\vec{p}$ operatörü incelendiğinde hermitik olmadıkları görülür. Ancak bu karışık çarpımlı operatörler $(xp_x+p_xx)/2$ veya $(\vec{r}.\vec{p}+\vec{p}.\vec{r})/2$ şeklinde simetrik hale getirilirse o zaman hermitik olurlar.

$\vec{r}$ ve $\vec{p}$ nin hermitik olduğunu bildikten sonra, bunların fonksiyonu olan diğer operatörlerin de hermitik olacağı kolayca ispat edilebilir. Bunlar arasında

Açısal momentum operatörü : $\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$

ve Hamiltonyen operatörü : $H=p^2/2m+V(\vec{r})$

birer hermitik operatördürler.

Hermitik bir operatörün matris temsiline bakalım: Bir $\hat{A}$ hermitik operatörünün $\{u_i\}$ bazındaki herhangi iki u_i, u_j vektörü için A_{ij} elemanını yazarsak

$$(u_i,\hat{A}u_j)=(\hat{A}u_i,u_j)=(u_j,\hat{A}u_i)^{*}$$

(1.eşitlikte hermitik operatör tanımı, 2.eşitlikte ise skaler çarpımın özelliği kullanıldı).Bunun matris temsili

$$A_{ij}=A_{ji}^{*}$$

olur. Daha açık bir deyişle, satır ve sütun indisleri değiştirilip kompleks eşleniği alındığında aynı matris bulunur. Özel olarak, matris elemanları reel ise, matrisin transpozu kendisine eşit olur.

Her $\hat{A}$ operatörü, kendi özvektörleri bazında köşegen bir matris olur:

$$\hat{A}u_j=\lambda_j u_j$$

$$A_{ij}=(u_i,\hat{A}u_j)=\lambda_j(u_i,u_j)=\lambda_j\delta_{ij}$$

Görüldüğü gibi, köşegen üzerindeki elemanlar $\hat{A}$ operatörünün özdeğerleri olurlar.

Şimdi, hermitik operatörlerin en önemli iki özelliğine geliyoruz. Hermitik bir operatör için aşağıdaki iki teorem doğrudur:

1. *Hermitik bir operatörün özdeğerleri reeldir.*

   İspat: $\hat{A}\psi(\vec{r})=\lambda\psi(\vec{r})$ özdeğer denkleminin yine ψ ile skaler çarpımını alalım:

$$(\psi,\hat{A}\psi)=\lambda(\psi,\psi)$$

   Hermitik operatör için $(\phi,\hat{A}\psi)=(\hat{A}\phi,\psi)$ olduğu gözönüne alınırsa

$$\begin{aligned}\lambda(\psi,\psi) &= (\psi,\hat{A}\psi)\\ &= (\hat{A}\psi,\psi)=(\lambda\psi,\psi)\\ \lambda(\psi,\psi) &= \lambda^{*}(\psi,\psi)\end{aligned}$$

   veya $\lambda^{*}=\lambda$ olmalıdır. Kendi eşleniğine eşit olan bir sayı reel olacağından, hermitik operatörün özdeğeri de reel olur.

Bu özellik önemlidir. Fiziksel büyüklükler deneysel olarak ölçüldüğünde bulunan değerlerin reel sayılar olması gerekir. Bu teorem fiziksel büyüklüklerin hermitik operatörlerle temsil edilmeleri gerektiğini göstermektedir.

2. *Hermitik bir operatörün farklı özdeğerlerine karşılık gelen özvektörleri birbirine dik (ortogonal) olurlar.*

İspat: λ_1 ve λ_2 gibi farklı iki özdeğere karşılık gelen özvektörler ψ_1 ve ψ_2 olsun. Bunlar özdeğer denklemini sağladıklarından

$$\hat{A}\psi_1 = \lambda_1\psi_1 \qquad \text{ve} \qquad \hat{A}\psi_2 = \lambda_2\psi_2 \qquad \text{yazılabilir.}$$

Birinci ifadeyle ψ_2 nin, ikinci ifadeyle de ψ_1 in skaler çarpımları farkına bakalım:

$$\begin{aligned} \lambda_1(\psi_2,\psi_1) - \lambda_2(\psi_2,\psi_1) &= (\psi_2,\hat{A}\psi_1) - (\hat{A}\psi_2,\psi_1) \\ (\lambda_1-\lambda_2)(\psi_2,\psi_1) &= (\psi_2,\hat{A}\psi_1) - (\psi_2,\hat{A}\psi_1) = 0 \end{aligned}$$

hermitik olduğundan sağ taraftaki 2.terimde $(\hat{A}\psi_2,\psi_1) = (\psi_2,\hat{A}\psi_1)$ özelliği kullanıldı. Bu ifadeye göre, eşitliğin sol tarafındaki $(\lambda_1-\lambda_2)(\psi_2,\psi_1)$ sıfır olmalıdır. $\lambda_1 \neq \lambda_2$ seçilmiş olduğundan, $(\psi_2,\psi_1) = 0$ veya bu iki özvektör ortogonal olmak zorundadırlar.

$\lambda_1 = \lambda_2$ ise bu iki vektörün ortogonal olup olmadıklarını bilemeyiz.

Bu kısımda varılmak istenen nokta, hermitik operatörlerin özvektörleriyle ortonormal bir baz oluşturulabileceğidir. Bu bakımdan $\lambda_1 = \lambda_2$ durumunu aydınlığa kavuşturmak zorundayız.

Aynı bir E enerji özdeğerine ψ_1 ve ψ_2 gibi farklı iki özfonksiyon karşılık geliyorsa, E bir *katlı durum*dur denir. Tek boyutlu problemlerde böyle bir durumla karşılaşmamıştık. Ancak iki veya üç boyutlu problemlerde görülen katlı durumlara örnek olarak, hidrojen atomundaki enerji özdurumlarını gösterebiliriz. $1s$ durumunda 2 elektron, $2p$ durumunda 6 elektron bulunabildiği için, birincisi 2 kere katlı, ikincisi ise 6 kere katlı birer durumdur. Katlı durumlara ilerde bir çok örnek görülecektir.

5.2.2 GRAMM-SCHMIDT DİKLEŞTİRME YÖNTEMİ

Yukardaki incelemede "$\lambda_1 = \lambda_2$ olduğunda ψ_1 ve ψ_2 özvektörleri dik değilse ne olur?" sorusuna cevap verelim: O zaman, bu iki vektörün lineer kombinasyonu alınıp dik iki vektör oluşturulur. Süperpozisyon ilkesi doğrultusunda, bu yeni vektörler de aynı enerji özdeğeri için Schrödinger denkleminin çözümleri olurlar.

Gramm-Schmidt yöntemi denilen bu tekniği en genel haliyle görelim: Aynı λ özdeğerine karşılık gelen M tane farklı özvektörü $(\psi_1,\psi_2,\ldots\psi_M)$ olsun.

Önce ψ_1 alınıp normlanır. Elde edilen normlanmış vektörü u_1 ile gösterelim:

$$(\psi_1,\psi_1) = N_1^2 \qquad \longrightarrow \qquad u_1 = \frac{\psi_1}{N_1}$$

Sonra, ψ_2 vektörü alınıp bunun yeni u_1 vektörü doğrultusundaki izdüşümü kadar bir vektör çıkarılarak yeni bir ψ_2' vektörü elde edilir:

$$\psi_2' = \psi_2 - (\psi_2,u_1)u_1$$

Bu ψ_2' vektörünün u_1 vektörüne dik olacağı kontrol edilebilir:

$$(\psi_2', u_1) = (\psi_2, u_1) - (\psi_2, u_1)(u_1, u_1) = 0$$

olur, çünkü u_1 normlanmıştı, $(u_1, u_1) = 1$. Dik olduğunu garanti ettikten sonra, bu ψ_2' vektörü normlanarak yeni u_2 vektörü bulunur:

$$(\psi_2', \psi_2') = N_2^2 \qquad \longrightarrow \qquad u_2 = \frac{\psi_2'}{N_2}$$

Bu yöntem sırasıyla $\psi_3, \psi_4, \ldots \psi_M$ vektörlerine uygulanır: Her ψ_i vektöründen, daha önce inşa edilen $i-1$ tane $u_1, u_2, \ldots u_{i-1}$ vektörleri ile skaler çarpımları kadar miktarlar çıkarılarak

$$\begin{aligned} \psi_i' &= \psi_i - (\psi_i, u_1)u_1 - (\psi_i, u_2)u_2 - \cdots - (\psi_i, u_{i-1})u_{i-1} \\ &= \psi_i - \sum_{j=1}^{i-1} (\psi_i, u_j)\, u_j \end{aligned}$$

$$(\psi_i', \psi_i') = N_i^2 \qquad \longrightarrow \qquad u_i = \frac{\psi_i'}{N_i} \qquad (i = 1,2,3,\ldots M)$$

ortonormal bir $\{u_i\}$ kümesi elde edilir.

Alıştırma 5.3: $[0,1]$ *aralığında tanımlanan aşağıdaki dalga fonksiyonlarını ortonormal hale getirin:*

$$\psi_1(x) = 1, \quad \psi_2(x) = x, \quad \psi_3(x) = x^2$$

Çözüm : Gramm-Schmidt yöntemi uyarınca, önce ψ_1 normlanarak u_1 bulunur:

$$\int_0^1 dx\, |\psi_1|^2 = \int_0^1 dx\, 1 = 1 \qquad \longrightarrow \qquad u_1(x) = 1$$

Daha sonra, ψ_2 nin bu yeni u_1 ile skaler çarpımı alınır ve ψ_2' oluşturulur:

$$\begin{aligned} (\psi_2, u_1) &= \int_0^1 dx\, x\, 1 = \frac{1}{2} \\ \psi_2' &= \psi_2 - (\psi_2, u_1)u_1 = x - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Bu son ifade normlanarak u_2 elde edilir:

$$\begin{aligned} (\psi_2', \psi_2') &= \int_0^1 dx\, (x - 1/2)^2 = 1/12 \\ u_2 &= \sqrt{12}(x - 1/2) \end{aligned}$$

Benzer şekilde u_3 bulunur:

$$\begin{aligned} (\psi_3, u_1) &= 1/3\,, \qquad (\psi_3, u_2) = 1/\sqrt{12} \\ \psi_3' &= \psi_3 - (1/3)u_1 - (1/\sqrt{12})u_2 = x^2 - x + 1/6 \\ (\psi_3', \psi_3') &= 1/180\,, \qquad \longrightarrow \qquad u_3 = \sqrt{180}(x^2 - x + 1/6) \end{aligned}$$

Sonuç olarak $u_1 = 1, u_2 = \sqrt{12}(x - 1/2)$ ve $u_3 = \sqrt{180}(x^2 - x + 1/6)$ fonksiyonları aranan ortonormal fonksiyonlardır.

Yukardaki sonuçları şöyle özetleyebiliriz:

- Hermitik bir operatörün özdeğerleri reel ve özvektörleri ortogonaldır. Katlı durumlar varsa, bunlar Gramm-Schmidt yöntemiyle ortonormal hale getirilebilir.
- Hermitik bir operatörün özvektörleri kümesi $\{u_i\}$, dalga fonksiyonu uzayında bir baz oluşturur.

Bu son teoremin ispatı ileri düzeyde kitaplarda bulunabilir (Courant and Hilbert, Cilt 1, Bölüm 2). Bu sonucu ispatsız kabul edeceğiz.

5.3 SÜPERPOZİSYON İLKESİ

Buraya kadar matematik formalizmi getirdikten sonra şimdi buna fiziksel içerik kazandıralım. Kuantum mekaniğinin gelişmesinde rol oynayan gözlemlerden en önemlisi, enerji ve açısal momentum gibi fiziksel büyüklüklerin kesikli enerji spektrumu gösterebilmesiydi. Yukarda ana hatları verilen lineer operatörler teorisinin bu yapıya sahip olması, kuantum mekaniğinde doğal olarak kullanılmasını gerekli kılar. Kuantum mekaniğinin son iki postülası bu matematiğin kullanılmasını düzenler:

Kuantum Mekaniğinin 3. Postülası: *Ölçülebilen her A fiziksel büyüklüğü bir $\hat{A}$ hermitik operatörü ile temsil edilir.Bu büyüklük ölçüldüğünde bulunacak değer $\hat{A}$ operatörünün $(a_1, a_2, \ldots)$ özdeğerlerinden biri olur.*

Kuantum mekaniğinin 4. Postülası: *Her ψ dalga fonksiyonu, herhangi bir fiziksel büyüklüğü temsil eden bir $\hat{A}$ operatörün özvektörlerinin serisi olarak açılabilir. Normlanmış bir ψ durumundaki sistemde A büyüklüğü ölçüldüğünde, a_n özdeğerinin elde edilme olasılığı*

$$P(a_n) = |(u_n, \psi)|^2 \tag{5.10}$$

ile verilir (u_n vektörü, a_n özdeğerine karşılık gelen özvektördür). Ölçme sonucu a_n özdeğeri bulunmuş ise, sistem bu andan itibaren $\hat{A}$ operatörünün u_n özdurumundadır.

Bu iki postüla kuantum mekaniğinde toplanabilirlik (*süperpozisyon*) ve ölçme kavramlarının temelini oluştururlar. Bu konuyu biraz açalım:

- Bir $\psi(x)$ dalga fonksiyonuyla belirlenen bir durumdaki sistemde A fiziksel büyüklüğünün değerini bilmek istiyoruz. Önce, bu büyüklüğe karşılık gelen $\hat{A}$ operatörü oluşturulur. Bu büyüklük $A(\vec{r}, \vec{p})$ gibi konum ve momentumun fonksiyonu ise, operatör karşılığı $\hat{A}(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla})$ olur.
- Bu operatörün özdeğer denklemi $\hat{A}u_n = a_n u_n$ çözülerek, a_n özdeğerleri ve u_n özdurumları bulunur. 3. postülaya göre, ölçme sonucu ancak bu a_n değerlerinden biri bulunabilir.
- Sistemin hazırlanmış olduğu ψ durumu zaten bu u_n özdurumlarından biriyse ($\psi \equiv u_n$), ölçme sonucu kesinlikle a_n değeri bulunur.

- Sistemin başlangıçtaki durumu $\hat{A}$ nın özdurumu değilse, o zaman $\{u_n\}$ özdurumlarının bir süperpozisyonudur. $\{u_n\}$ bazında bu durum

$$\psi = \sum_n c_n u_n \qquad ; \qquad c_n = (u_n, \psi)$$

olarak açılabilir. Ölçme sonucu bu seride yer alan herbir a_n özdeğerinin bulunma olasılığı vardır. 4. postülaya göre a_n değerinin bulunma olasılığı c_n katsayısının mutlak değer karesidir:

$$P(a_n) = |(u_n, \psi)|^2 = |c_n|^2$$

Alıştırma 5.4: $[0,L]$ aralığındaki sonsuz kuyu potansiyelinde bir parçacığın özenerji ve özdurumlarının

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \qquad \text{ve} \qquad u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$$

olduğu biliniyor. Bir deneyde bu parçacığın dalga fonksiyonu

$$\psi(x) = \sin \frac{2\pi x}{L} + 2 \sin \frac{7\pi x}{L}$$

olarak hazırlanmış olarak veriliyor. (a) Dalga fonksiyonunu normlayın. (b) Parçacığın enerjisi ölçülürse hangi enerji özdeğerlerinin hangi olasılıklarla bulunacağını hesaplayın. (c) Enerjinin beklenen değeri nedir?

Çözüm: (a) Normlama integrali hesaplanırsa

$$\int_0^L dx\, |\psi(x)|^2 = \int_0^L dx \left[\sin \frac{2\pi x}{L} + 2 \sin \frac{7\pi x}{L} \right]^2 = \frac{5}{2} L$$

bulunur. Buna göre normlanmış dalga fonksiyonu

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{5L}} \left[\sin \frac{2\pi x}{L} + 2 \sin \frac{7\pi x}{L} \right] = \frac{1}{\sqrt{5}} \left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{2\pi x}{L} + 2 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{7\pi x}{L} \right]$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{5}} u_2 + \frac{2}{\sqrt{5}} u_7 \qquad \text{olur.}$$

(b) Bu son ifadeden kolayca görüldüğü gibi, parçacığın durumu $n = 2$ ve $n = 7$ özdurumlarının bir süperpozisyonudur. Katsayılar yardımıyla bu durumlarda bulunma olasılıkları hesaplanır:

$$P(E_2) = |c_2|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{5}} \right|^2 = \frac{1}{5}$$

$$P(E_7) = |c_7|^2 = \left| \frac{2}{\sqrt{5}} \right|^2 = \frac{4}{5}$$

(c) Enerjinin beklenen değeri, bu olası enerji değerlerinin kendi olasılıkları ile çarpımlarının toplamı olur:

$$\begin{aligned}\langle E\rangle &= \sum_n P(E_n)E_n = P(E_2)\,E_2 + P(E_7)\,E_7 \\ &= \frac{1}{5}\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\,2^2 + \frac{4}{5}\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\,7^2 = 40\,\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\end{aligned}$$

Alıştırma 5.5 : $[0,a]$ aralığında bir sonsuz kuyu potansiyelinde bir parçacığın dalga fonksiyonu

$$\psi(x) = x(a-x)$$

olarak veriliyor. (a) Dalga fonksiyonunu normlayın. (b) n kuantum sayılı bir enerji özdurumunda parçacığın bulunma olasılığını hesaplayın. (c) Enerjinin beklenen değerini bulun.

Çözüm : (a) Normlama integrali

$$\int_0^a dx\,|\psi|^2 = \int_0^a dx\,x^2(a-x)^2 = \frac{a^5}{30}$$

olur. Buradan, normlanmış dalga fonksiyonu yazılır:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{30}{a^5}}\,x(a-x)$$

(b) Sonsuz kuyu potansiyelinin normlanmış özfonksiyonları

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$$

alınırsa, bunların ψ ile skaler çarpımları

$$\begin{aligned}c_n &= (u_n,\psi) = \int_0^a dx\,u_n(x)\;\psi(x) = \sqrt{\frac{2\times 30}{a\times a^5}}\int_0^a dx\,\sin\frac{n\pi x}{a}\,x(a-x) \\ &= \sqrt{60}\int_0^1 dy\,y(1-y)\sin(n\pi y) = \sqrt{60}\times\frac{2}{n^3\pi^3}\,[1-\cos n\pi]\end{aligned}$$

olur. Tek n değerleri için $\cos n\pi = -1$ ve çift n için $\cos n\pi = +1$ olacağından

$$c_n = \begin{cases}\dfrac{8\sqrt{15}}{n^3\pi^3} & n \text{ tek ise} \\ 0 & n \text{ çift ise}\end{cases}$$

(c) Enerjinin beklenen değeri $P(E_n) = c_n^2$ olasılıklarından hesaplanabilirse de, daha kolay yolu enerji operatörünü kullanmaktır. Kuyu içinde $V = 0$ olduğundan

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

alabiliriz. Bu yolla

$$\langle E\rangle = \int_0^a dx\,\psi(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right]\psi(x) = -\frac{30\hbar^2}{2ma^5}\int_0^a dx\,x(a-x)(-2)$$

$$\langle E\rangle = \frac{5\hbar^2}{ma^2} \qquad \text{elde edilir.}$$

5.4 SIRA DEĞİŞTİREN OPERATÖRLER ve ÖLÇME

Bu kısımda, fiziksel büyüklükleri ölçme işleminin, bunları temsil eden operatörlerle ilişkisini araştıracağız. Bir fiziksel büyüklüğün beklenen değeri zaman içinde nasıl değişir? İki büyüklük birlikte ölçüldüğünde nasıl bir sonuç bekleyebiliriz? Katlı durumlarda iki büyüklük birlikte nasıl ölçülür? Bu önemli sorulara genel formalizm içinde cevap verelim.

5.4.1 SIRA DEĞİŞTİRME VE BELİRSİZLİK İLKESİ

Bir sistemde iki fiziksel büyüklük birlikte ölçülmek istendiğinde nasıl bir sonuç bekleyebiliriz? Bölüm 3 de belirsizlik bağıntısını incelerken, örnek olarak, tek boyutta x konumu ile p momentumunun birlikte kesin olarak ölçülemiyeceğini görmüştük. Bu durum 3 boyutta ve herhangi iki fiziksel büyüklük için de böyle midir?

İki operatör birlikte etkidiği zaman sıralama önemlidir. $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ gibi iki operatör için $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ farkına $\hat{A}$ ile $\hat{B}$ nin *komütatörü* denir ve $[\hat{A},\hat{B}]$ ile gösterilir.

En temel sıra değiştirme bağıntısı konum ile momentum arasındadır. Tek boyutta $\hat{p} = -i\hbar d/dx$ olduğundan

$$[x,p] = i\hbar \tag{5.11}$$

olur. 3 boyutlu uzayda ise, bileşenlerin komutatörlerine bakmak gerekir. Momentum operatörünün y-bileşeni $p_y = -i\hbar\partial/\partial y$ olduğundan

$$[x,p_x] = i\hbar\,, \qquad [x,p_y] = 0\,, \qquad [x,p_z] = 0$$

bulunur. Bu sonucu diğer bileşenler için genelleştirirsek ($x = x_1, y = x_2, z = x_3$ olarak gösterilirse)

$$[x_i,p_j] = i\hbar\delta_{ij} \qquad (i,j) = 1,2,3 \tag{5.12}$$

yazılabilir.

Bu sonuca dayanarak, p nin fonksiyonu her $A(p)$ operatörü ve x in fonksiyonu her $B(x)$ operatörü için (tek boyutta)

$$[x,A(p)] = i\hbar\frac{dA}{dp} \tag{5.13}$$

$$[B(x), p] = i\hbar \frac{dB}{dx} \tag{5.14}$$

komütatör bağıntılarını çıkarabiliriz.

A ve B gibi iki büyüklüğü temsil eden operatörleri $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ ile gösterelim. Bu iki operatörün komütatörü

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$$

gibi yeni bir $\hat{C}$ operatörü olsun.

ψ dalga fonksiyonu ile belirtilmiş bir durumda bu iki büyüklük ölçüldüğünde, bulunacak değerlerin standard sapmaları

$$\Delta A^2 = \int_V d^3r\, \psi^*(\vec{r})\, \left(\hat{A} - \langle A \rangle\right)^2\, \psi(\vec{r})$$
$$\Delta B^2 = \int_V d^3r\, \psi^*(\vec{r})\, \left(\hat{B} - \langle B \rangle\right)^2\, \psi(\vec{r})$$

bağıntılarıyla verilmiştir.

$$\mathscr{A} = \hat{A} - \langle A \rangle \qquad \text{ve} \qquad \mathscr{B} = \hat{B} - \langle B \rangle$$

gibi iki yeni operatör tanımlayalım. $\mathscr{A}$ ve $\mathscr{B}$ operatörlerinin iki özelliği kolayca görülebilir:

- $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ hermitik olduğundan, $\mathscr{A}$ ve $\mathscr{B}$ de hermitik olurlar.
- $[\mathscr{A}, \mathscr{B}] = [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$ olur.

Bu yeni operatörler cinsinden, yukardaki ifadeler

$$\Delta A^2 = (\psi, \mathscr{A}^2 \psi) \qquad \Delta B^2 = (\psi, \mathscr{B}^2 \psi)$$

olurlar. $\mathscr{A}$ ve $\mathscr{B}$ nin hermitik olma özelliğinden dolayı, $\mathscr{A}^2$ den bir $\mathscr{A}$ faktörü diğer tarafa etki edebilir.

$$\Delta A^2 = (\mathscr{A}\psi, \mathscr{A}\psi) \qquad \Delta B^2 = (\mathscr{B}\psi, \mathscr{B}\psi)$$

$\mathscr{A}$ operatörünün ψ ye etkisi sonucu $\mathscr{A}\psi = \psi_A$ dalga fonksiyonu oluştuğunu düşünelim. $\mathscr{B}$ için de benzer şeyi yazalım:

$$\Delta A^2 = (\psi_A, \psi_A) \qquad \Delta B^2 = (\psi_B, \psi_B)$$

Şimdi, bu iki belirsizlik ifadesinin çarpımına bakalım:

$$\Delta A^2\, \Delta B^2 = (\psi_A, \psi_A)\, (\psi_B, \psi_B)$$

Schwarz eşitsizliği kullanarak, sağ taraftaki iki normun çarpımı yerine, ψ_A ile ψ_B nin skaler çarpımının mutlak değer karesi yazılırsa, bulunacak eşitsizlik

$$\Delta A^2\, \Delta B^2 \geq |(\psi_A, \psi_B)|^2$$

olur. Sağ tarafta yine hermitik özelliği kullanalım:

$$(\psi_A, \psi_B) = (\mathscr{A}\psi, \mathscr{B}\psi) = (\psi, \mathscr{A}\mathscr{B}\psi)$$

Herhangi iki operatör çarpımı daima şöyle iki terimin toplamı olarak yazılabilir:

$$\mathscr{A}\mathscr{B} = \frac{\mathscr{A}\mathscr{B} - \mathscr{B}\mathscr{A}}{2} + \frac{\mathscr{A}\mathscr{B} + \mathscr{B}\mathscr{A}}{2}$$

Birinci terimdeki komutatörün $\hat{C}$ olduğu gözönüne alınırsa

$$(\psi_A, \psi_B) = (\psi, \mathscr{A}\mathscr{B}\psi) = \left(\psi, \frac{\hat{C}}{2}\psi\right) + \left(\psi, \frac{\mathscr{A}\mathscr{B} + \mathscr{B}\mathscr{A}}{2}\psi\right)$$

(ψ_A, ψ_B) nin mutlak değer karesi bu iki terimden birinin mutlak değer karesinden daima büyük olacaktır:

$$|(\psi_A, \psi_B)|^2 \geq |(\psi, \hat{C}/2\ \psi)|^2$$

Bu eşitsizlik belirsizlikler çarpımında kullanılırsa

$$\Delta A^2\ \Delta B^2 \geq |(\psi, \hat{C}/2\ \psi)|^2$$

ve sonuç olarak

$$\boxed{\Delta A\ \Delta B \geq |(\psi, \hat{C}/2\ \psi)|} \qquad (5.15)$$

bulunur.

Bu sonuç, *Belirsizlik ilkesi*nin genelleştirilmiş halidir:

- *İki operatör sıra değiştiriyorsa ($\hat{C} = 0$), belirsizlikleri çarpımı 0 veya daha büyük olacak, yani birlikte kesin olarak ölçülebileceklerdir.*

  Örneğin, konumun x bileşeni ile momentumun p_y bileşeni için $[x, p_y] = 0$ olduğundan, bu iki büyüklüğü aynı anda kesin olarak bilmek mümkündür.

- *Sıra değiştirmeyen iki operatör ($\hat{C} \neq 0$), aynı deneyde mutlak kesinlikle ölçülemezler.* Bu iki operatörün belirsizlikleri çarpımı, bunların komütatörü olan $\hat{C}$ operatörünün beklenen değeri ile sınırlıdır.

  Örneğin, konumun x bileşeni ile momentumun p_x bileşeni için $[x, p_x] = i\hbar$ ve

$$\begin{aligned} \Delta x\ \Delta p_x &\geq |(\psi, i\hbar/2\ \psi)| \\ &\geq \hbar/2 \end{aligned}$$

  olduğundan, ikisi aynı anda mutlak kesinlikle bilinemezler; belirsizlikleri çarpımı $\hbar/2$ den büyük olmalıdır.

5.4.2 BİR FİZİKSEL BÜYÜKLÜĞÜN ZAMANLA GELİŞİMİ

Bir sistemin durumunu veren dalga fonksiyonu, Schrödinger denklemi

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi(\vec{r},t)$$

nin çözümü olarak her t zamanı için bulunabilir. Bu durumda, fiziksel bir A büyüklüğü için hesaplanan $\langle A\rangle$ beklenen değeri de zamana bağlı olarak değişecektir. Bu değişmenin nasıl olduğunu inceleyelim.

En genel durumda, dalga fonksiyonunun yanısıra, $\hat{A}$ operatörü de t nin bir fonksiyonu olabilir:

$$\hat{A} = \hat{A}(\vec{r},\vec{p},t)$$

Böyle bir operatörün bir $\psi(\vec{r},t)$ durumunda ve t anındaki beklenen değeri

$$\langle A\rangle = (\psi,\hat{A}\psi) = \int_V d^3r\ \psi^*(\vec{r},t)\ \hat{A}(\vec{r},\vec{p},t)\ \psi(\vec{r},t)$$

genellikle t nin bir fonksiyonu olacaktır. $\langle A\rangle$ nın zamana göre türevini inceleyelim:

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}(\psi,\hat{A}\psi) = \left(\frac{\partial\psi}{\partial t},\hat{A}\psi\right) + \left(\psi,\hat{A}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right) + \left(\psi,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right)$$

Kısmi türevler Schrödinger denkleminden $\partial\psi/\partial t = (-i/\hbar)\hat{H}\psi$ olarak yerine konursa

$$\begin{aligned}\frac{d\langle A\rangle}{dt} &= \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\psi,\hat{A}\psi) - \frac{i}{\hbar}(\psi,\hat{A}\hat{H}\psi) + \left(\psi,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right)\\ &= \frac{i}{\hbar}(\psi,\hat{H}\hat{A}\psi) - \frac{i}{\hbar}(\psi,\hat{A}\hat{H}\psi) + \left(\psi,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right)\\ &= \frac{i}{\hbar}(\psi,(\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H})\psi) + \left(\psi,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right)\end{aligned}$$

yazılabilir (ikinci satırda $\hat{H}$ nın hermitik olma özelliği kullanıldı). Sonuç olarak

$$\boxed{\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{A}]\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle} \qquad (5.16)$$

bulunur. Eğer $\hat{A}$ operatörü t den bağımsızsa $\partial\hat{A}/\partial t = 0$ olur ve

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{A}]\rangle \qquad (5.17)$$

Bu sonuca göre, fiziksel büyüklüğün beklenen değerinin zaman içindeki değişimi, onu temsil eden operatörün hamiltonyen operatörüyle komütatörüne oranlıdır.

Eğer $[\hat{H},\hat{A}] = 0$ ise A büyüklüğünün beklenen değeri zaman içinde değişmez. Bu tür fiziksel büyüklüklere klasik mekanikte *hareket sabitleri* denir. Özel olarak $[\hat{H},\hat{H}] = 0$ olduğundan, sistemin E enerjisi her zaman bir hareket sabitidir. Serbest parçacık için, $\hat{H} = p^2/2m$ ve $[\hat{H},\vec{p}] = 0$ olacağından, momentum da bir hareket sabiti olur.

5.4.3 ENERJİ-ZAMAN BELİRSİZLİK BAĞINTISININ FİZİKSEL YORUMU

Bölüm 2 de konum-momentum belirsizlik bağıntısıyla beraber, özel bir durumda (serbest parçacık için) enerji-zaman belirsizlik bağıntısını da elde etmiştik:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \qquad \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Bu bağıntılarda Δt belirsizliğinin yer alması biraz rahatsız edicidir. Çünkü, Δt belirsizliğinin anlamı, diğerlerinin yanında, pek açık değildir. Bunu biraz açalım:

$p, x, E, \ldots$ gibi büyüklükler bir sisteme ait *dinamik değişkenler*dir; bunların ölçümlerindeki $\Delta p, \Delta x, \Delta E, \ldots$ belirsizlikleri incelenen sisteme aittir. Oysa, kuantum mekaniğinde *t bağımsız değişken*dir; bu nedenle, kendi başına bir Δt zaman belirsizliğinden sözetmek anlamsızdır.

Oysa, yukarda incelediğimiz beklenen değerlerin zaman içindeki değişimini gözönüne alırsak, Δt belirsizliğine bir yorum getirebiliriz. Bunun için, genelleştirilmiş belirsizlik bağıntısını (Denklem 5.15),

$$\Delta A \Delta B \geq \tfrac{1}{2} \left| \left(\psi, [\hat{A}, \hat{B}] \psi \right) \right|$$

ve beklenen değerin zaman içindeki değişimi ifadesini (Denklem 5.17)

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle$$

tekrar yazalım. Yukardaki bağıntıda B operatörü yerine H hamiltonyeni seçilir ve bunun belirsizliği ΔE ile gösterilirse (mutlak değer alındığından sıralama önemli değildir):

$$\Delta A \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle A \rangle}{dt} \right|$$

Şimdi, A büyüklüğünün beklenen değerinin zamandaki değişimine bağlı olarak bir Δt zaman belirsizliğini şöyle tanımlayalım:

$$\Delta t \equiv \frac{\Delta A}{\left| \dfrac{d\langle A \rangle}{dt} \right|} \tag{5.18}$$

İşte, ancak böyle tanımlanan bir Δt için, enerji-zaman belirsizlik bağıntısı yazılabilir:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Denklem 5.18 deki tanımı yeniden düzenleyip yazarsak

$$\Delta A = \left| \frac{d\langle A \rangle}{dt} \right| \Delta t$$

olur. Bunu şöyle yorumlayabiliriz: Δt belirsizliği, A nın beklenen değerindeki değişmenin bir ΔA kadar olması için geçen zamandır. Bu zaman aralığında enerji ΔE kadar belirsizdir.

Buradan çıkan önemli sonuç şudur: *Δt zaman belirsizliği ölçmek istediğimiz değişkene bağlıdır.* Bu, bir deneyde salınım periyodu, başka bir deneyde kararsız bir parçacığın yarıömrü olabilir.

5.4.4 SIRA DEĞİŞEN OPERATÖRLERİN ORTAK ÖZVEKTÖRLERİ

Bir önceki kısımdan hatırlanacağı üzere, sıra değiştiren iki operatör aynı anda kesin olarak ölçülebiliyorlardı.

$\hat{A}$ ve $\hat{B}$ gibi iki lineer operatörün ikisinin de özdeğer denklemini sağlayan ortak bir ψ özvektörü olduğunu varsayalım:

$$\hat{A}\psi = a\psi \qquad \text{ve} \qquad \hat{B}\psi = b\psi$$

Burada a ve b sırasıyla $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ nin özdeğerleri olur.

Birinci denkleme $\hat{B}$, ikinci denkleme ise $\hat{A}$ operatörünü etki ettirelim:

$$\begin{aligned} \hat{B}\hat{A}\psi &= \hat{B}(a\psi) = a(\hat{B}\psi) \\ &= ab\psi \\ \hat{A}\hat{B}\psi &= \hat{A}(b\psi) = b(\hat{A}\psi) \\ &= ba\psi = ab\psi \end{aligned}$$

Bu iki denklemin farkı

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = [\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

olur. O halde, *iki operatörün ortak özvektörleri olabilmesi için gerekli koşul bu iki operatörün sıra değiştirir olmasıdır.* Bu sonuç, ikiden fazla operatör için de kolayca ispatlanabilir.

Yukardaki ara denklemlerden ikisini tekrar yazalım:

$$\begin{aligned} \hat{A}\psi &= a\psi \\ \hat{A}\,(\hat{B}\psi) &= a\,(\hat{B}\psi) \end{aligned}$$

Başka bir deyişle, *iki operatör sıra değiştiriyorsa ve ortak özvektörleri ψ ise, o zaman $\psi' = \hat{B}\psi$ de $\hat{A}$ nın aynı özdeğerine karşılık gelen diğer bir özvektörü olur.* Yani, $\hat{B}$ operatörü, katlı a özdeğerine karşılık gelen özvektörler arasında ayırım yapılmasını sağlar.

Bu sonuçlar, katlı durumlar sözkonusu olduğunda nasıl bir yol izleneceğini bize gösterir. Burada, hidrojen atomu yapısını örnek alarak yola devam edelim (hidrojen atomu daha sonra ayrıntılı olarak incelenecektir; modern fizik derslerindeki bilgi burada yeterlidir):

- Hidrojen atomunun hamiltonyen operatörü için $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$ özdeğer problemi çözüldüğünde enerji seviyeleri $E_n = -13.6/n^2$ eV olarak bulunur. Örneğin, $n = 2$ ile verilen L seviyesinde bulunan 8 elektron da aynı E_2 enerjiye sahiptirler, yani E_2 özdeğerli durum 8 kez katlıdır. Bu durumları ψ_n ile gösterelim.

- Açısal momentum operatörü $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ nin karesi L^2 operatörü hamiltonyen operatörüyle sıra değiştirir: $[\hat{H}, L^2] = 0$. O halde L^2 büyüklüğü de aynı anda ölçülebilir. Bu L^2 operatörüyle ψ_n durumuna etki edersek yine hamiltonyen operatörünün özdurumunu değiştirmiş olmayız. Ancak, bu kez *L^2 operatörü bu ortak özvektörler arasında kendi özdeğerine göre bir ayırım yapacaktır.* Bu örnekteki $n = 2$ durumunda $l = 0, 1$ olabileceğinden bu 8 katlı durum, $l = 0$ ($2s$ durumları) veya $l = 1$ ($2p$ durumları) gibi iki sınıfa ayrılacaktır. Bu durumları ψ_{nl} ile gösterelim.

- Ancak, hâla $2s$ durumu 2 kez katlı, $2p$ durumu ise 6 kez katlıdırlar. Bu kez, açısal momentumun z-bileşeni olan $L_z = xp_y - yp_x$ operatörü ele alınır. Bu operatör de hem H hamiltonyeni, ve hem de L^2 operatörüyle sıra değiştirdiği için ($[\hat{H}, L_z] = [L^2, L_z] = 0$) aynı anda ölçülebilir ve ψ_{nl} özvektörlerine ortaktır. Bu L_z operatörüyle etki ettiğimizde, ψ_{nl} özdurumları, L_z nin özdeğerlerinin aldığı değerlere göre yine kendi aralarında ayrılacaklardır. Örneğin, $2p$ durumunda $l_z = -1, 0, 1$ olabileceğinden, 6 kez katlı olan $2p$ durumu kendi içinde 3 sınıfa ayrılır. Bu durumları şimdi ψ_{nll_z} olarak gösterebiliriz.

- Bu teknik, tüm katlı durumlar kendi aralarında ayrılabilir oluncaya kadar, böyle sürdürülebilir (yukardaki örnekte, daha sonra *spin* operatörü kullanılarak katlılık tamamen kaldırılmış olur).

5.5 DİRAC BRA-KET NOTASYONU

3-boyutlu vektör uzayından hatırlayalım: bir $\vec{a}$ vektörü, S-koordinat sisteminde (a_x, a_y, a_z) bileşenleriyle temsil edileceği gibi, yine aynı uzayda seçilen başka bir S'-koordinat sisteminde (a'_x, a'_y, a'_z) bileşenleri ile de temsil edilebilir. Bileşenler farklı olmakla beraber, temsil ettikleri vektör aynı $\vec{a}$ vektörüdür. Yani, vektörün varlığı koordinat sisteminin seçiminden bağımsızdır.

Bir sistemin durumunu temsil eden $\psi(x)$ dalga fonksiyonu ile, onun Fourier dönüşümü olan

$$\phi(p) = \int dx\, \psi(x)\, \mathrm{e}^{-ipx/\hbar}$$

$\phi(p)$ fonksiyonu *yine aynı fiziksel durumun* momentum uzayındaki temsilidir. O halde, bu fiziksel durumu, konum veya momentum uzayına bağlı kalmadan düşünebiliriz.

Gerçekte, bir sistemin durumunu belirleyen nedir? Fiziksel açıdan bakıldığında, dalga fonksiyonu $\psi(x)$ in nasıl bir fonksiyon olduğu önemli değildir, çünkü zaten dalga fonksiyonunun kendisi gözlenen bir şey değildir. *Durumu belirleyen kuantum sayılarıdır.* Tek boyutlu problemlerde yeterince gördüğümüz gibi, hesaplanan beklenen değerler (enerji, konum, momentum,...) sonunda n kuantum sayısına bağlı olarak çıkar.

O halde, $\psi(x)$ dalga fonksiyonu ile verilen fiziksel durumu, x veya p uzayına bağlı kalmadan temsil eden, soyut bir durum vektörünün varlığından bahsedebiliriz. Bu durum vektörü $|\psi\rangle$ ile gösterilir ve adına *ket vektörü* denir.

$|\psi\rangle$ ket vektörleri yine sonsuz boyutlu bir lineer vektör uzayı oluştururlar. Daha önce yazılmış olan tüm bağıntıların Dirac notasyonunda karşılığı vardır. Örneğin, c bir kompleks sayı ve $\hat{A}$ bir operatör ise

$$|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \longrightarrow \begin{cases} \psi'(x) = \hat{A}\psi(x) \\ \phi'(p) = \hat{A}\phi(p) \end{cases}$$

$$c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle \longrightarrow \begin{cases} c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x) \\ c_1\phi_1(p) + c_2\phi_2(p) \end{cases}$$

$\hat{A}$ operatörünün, sağındaki ket vektörüne etki ettiğine dikkat edilmelidir.

Her $|\psi\rangle$ ket vektörüne karşılık gelen öyle bir eşlenik *bra vektörü* $\langle\psi|$ vardır ki skaler çarpım bra ve ket vektörleri arasında tanımlanır. $u(x)$ ve $v(x)$ dalga fonksiyonlarının momentum uzayındaki temsilleri $\tilde{u}(p)$ ve $\tilde{v}(p)$ olsun. Skaler çarpım, bu temsillerden bağımsız olarak $\langle u||v\rangle \equiv \langle u|v\rangle$ şeklinde gösterilir:

$$(u,v) = \langle u|v\rangle = \begin{cases} \int dx\, u^*(x)v(x) \\ \int dp\, \tilde{u}^*(p)\tilde{v}(p) \end{cases}$$

Bra ve ket vektörleri arasındaki ilişki, matris temsili gözönüne alındığında daha iyi anlaşılabilir: Bir $\{u_i\}$ bazında ψ dalga fonksiyonu $\psi = \sum c_i u_i$ ile, yani (c_i) sütun vektörü ile gösteriliyordu. Bunun bir $\phi = \sum d_i u_i$ vektörü ile skaler çarpımı $\sum d_i^* c_i$ ile verildiğine göre, $\langle\psi|$ bra vektörü bir satır vektörü ile temsil edilmelidir.

Bra vektörünün dikkat edilmesi gereken özellikleri şunlardır:

1. $|\psi'\rangle = c|\psi\rangle$ ket vektörüne karşılık gelen bra vektörü $\langle\psi'| = \langle\psi|c^*$ olur.
2. $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ ise $\langle\psi'| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger$ olur ve $\hat{A}^\dagger$ operatörü solundaki bra vektörüne etki eder.

Dirac notasyonunda baz vektörleri $u_1(\vec{r}), u_2(\vec{r}), \ldots = \{u_i\}$ kümesi

$$|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle, \ldots |u_n\rangle$$

veya daha basit olarak

$$|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \ldots |n\rangle$$

şeklinde gösterilirler. Bunların ortonormallik bağıntısı

$$\int d^3r\, u_i^*(\vec{r})\, u_j(\vec{r}) = \delta_{ij} \qquad \longrightarrow \qquad \langle i|j\rangle = \delta_{ij}$$

ve keza, bir ψ dalga fonksiyonunun bir bazda açılımı

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n c_n u_n(\vec{r}) \qquad \longrightarrow \qquad |\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

$$c_n = (u_n, \psi) = \int d^3r u_n^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) \qquad \longrightarrow \qquad c_n = \langle n|\psi\rangle$$

olarak gösterilirler. Yukardaki $|\psi\rangle$ ifadesinde c_n katsayıları kullanılırsa

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle|n\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \left[\sum_n |n\rangle\langle n|\right]|\psi\rangle$$

Bu eşitliğin sağlanabilmesi için parantez içindeki operatörün birim operatöre eşit olması gerekir. Buradan, *kapalılık bağıntısı*

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

olarak yazılır. Dikkat edilirse $|n\rangle\langle n|$ ile $\langle n|n\rangle$ farklı şeylerdir. Birincisi bir operatör (veya, bir sütun vektörünün bir satır vektörüyle sağdan çarpımı), ikincisi ise bir sayı (bir satır vektörünün bir sütun vektörüyle sağdan çarpımı)dır.

Bir $\hat{A}$ operatörünün matris temsili Dirac notasyonunda

$$(u_i, \hat{A}u_j) = \int d^3r\, u_i^*(\vec{r})\hat{A}u_j(\vec{r}) \longrightarrow \langle i|A|j\rangle$$

olarak yazılabilir.

5.5.1 SÜREKLİ İNDİSLİ BAZ

Yukarda verilen baz vektörleri kümesi $|n\rangle$ için n indisi ($n = 1,2,3,\ldots$) şeklinde kesikli olarak sonsuza kadar değerler alabiliyordu. Bu indisin sürekli değerler aldığı durumda ne olur?

Bu duruma örnek olarak parçacığın $\hat{x}$ konum operatörünü verebiliriz. Bu operatörün özdeğerleri $[-\infty, +\infty]$ aralığında sürekli olarak değişebilirler. Genel formalizm içinde, bu $\hat{x}$ operatörünün özketlerini baz olarak alıp $|x\rangle$ yazdığımızda,

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \qquad -\infty < x < \infty$$

olur.

Bir $|\psi\rangle$ ket vektörünü bu bazda açtığımızda, n indisli toplam yerine dx değişkenli bir integral, c_n katsayıları yerine $c(x)$ fonksiyonları yazmalıyız:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, c(x)\, |x\rangle \\ c(x) &= \langle x|\psi\rangle \end{aligned}$$

$|\psi\rangle$ nin normunu $\{u_n\}$ bazında $\sum_n |c_n|^2$ olarak yazıyorduk. Sürekli indisli $|x\rangle$ bazında yine toplama yerine integral alarak

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int dx\, |c(x)|^2$$

yazabiliriz. Bu ifadeyi norm için bildiğimiz $\int dx|\psi(x)|^2$ ifadesiyle karşılaştırdığımızda, $c(x)$ katsayılarının x uzayındaki bildiğimiz $\psi(x)$ dalga fonksiyonları olduğunu görürüz:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \langle x|\psi\rangle \\ |\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)|x\rangle \end{aligned}$$

Dirac bra-ket notasyonu ileriki bölümlerde oldukça sık kullanılacaktır. Daha az yer kaplaması yanısıra, fiziksel bağıntıları her türlü temsilin üstünde ve yalın bir şekilde ifade edebilmesi, bu notasyonun en yararlı özelliğidir.

5.6 BAZI ÖZEL OPERATÖRLER

5.6.1 PARİTE OPERATÖRÜ

Parite bir fonksiyonun tek veya çift olma özelliğidir. Bir $f(x)$ fonksiyonu için

$f(-x) = -f(x)$ ise fonksiyonun paritesi tek,

$f(-x) = f(x)$ ise fonksiyonun paritesi çift olur.

Kuantum mekaniğinde *parite operatörü* $\mathscr{P}$, dalga fonksiyonuna etkisi ile tanımlanır:

$$\mathscr{P}\psi(\vec{r},t) = \psi'(\vec{r},t) = \psi(-\vec{r},t)$$

yani, parite operatörünün etkisi, (x,y,z) konumlu bir yerdeki dalga fonksiyonuna O orijinine göre tamamen zıt $(-x,-y,-z)$ konumlu yerdeki dalga fonksiyonunu karşılık getirmektir.

Bu operatörün klasik bir karşılığı yoktur ($\vec{r}$ ve $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ operatörleri cinsinden yazılamadığı için).

Parite operatörünü özellikleriyle tanıyalım:

(a) $\mathscr{P}^2\psi(\vec{r}) = \mathscr{P}\psi(-\vec{r}) = \psi(\vec{r})$

olduğundan $\mathscr{P}^2 = 1$ veya birim operatör olur. Bu özellik parite operatörünün özdeğerlerini bulmamızı sağlar. $\mathscr{P}u = \lambda u$ özdeğer problemi için

$$\begin{aligned} \mathscr{P}^2 u &= 1\,u \\ \mathscr{P}\mathscr{P}u &= \mathscr{P}(\lambda u) = \lambda(\mathscr{P}u) = \lambda^2 u \end{aligned}$$

İki sonuç karşılaştırıldığında

$$\lambda^2 = 1 \quad \text{veya} \quad \lambda = \pm 1$$

bulunur. $\lambda = 1$ özdeğerine karşılık gelen özfonksiyonlar *çift* pariteli, $\lambda = -1$ özdeğerine karşılık gelenler de *tek* pariteli olurlar. Gerçekten de, $\lambda = 1$ demek, $\mathscr{P}u(x) = u(x)$ veya $u(-x) = u(x)$ demektir, yani $u(x)$ bir çift fonksiyondur.

(b) $\hat{H} = p^2/2m + V(x)$ tek boyutlu hamiltonyeni ile parite operatörünün sıra değiştirme bağıntısını inceleyelim:

Momentum operatörü $p = -i\hbar d/dx$ olarak yazılırsa

$$\mathscr{P}p\psi(x) = \mathscr{P}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x)\right) = -i\hbar\frac{d}{d(-x)}\psi(-x) = -i\hbar\frac{d}{d(-x)}\mathscr{P}\psi(x) = -p\mathscr{P}\psi(x)$$

olur. Yani, parite operatörü $\vec{p}$ momentum vektörünün de tamamen zıttı olan $-\vec{p}$ vektörünü verir. Ancak, $p^2/2m$ yine aynı kalacağından, parite operatörü kinetik enerji kısmıyla sıra değiştirir.

Potansiyel fonksiyonu için parite operatörünün etkisi

$$\mathscr{P}V(x)\psi(x) = V(-x)\psi(-x) = V(-x)\mathscr{P}\psi(x)$$

olur. Sıra değiştirme olabilmesi için $V(-x) = V(x)$ yani potansiyel bir çift fonksiyon olmalıdır. O halde

$$[\hat{H}, \mathscr{P}] = 0 \qquad \text{(çift bir potansiyel fonksiyonu için)}$$

Parite operatörü hamiltonyenle sıra değiştirdiği durumda:

(a) Schrödinger denkleminin çözümleri parite operatörünün de özfonksiyonları, yani tek veya çift fonksiyon olurlar. Bu özelliği kuyu potansiyeli çözümünde kullanmıştık.

(b) $\mathscr{P}$ bir hareket sabitidir, yani zaman içinde dalga fonksiyonunun tek veya çift oluşu değişmez.

5.6.2 İZDÜŞÜM OPERATÖRÜ

Hermitik bir $\hat{A}$ operatörünün özfonksiyonlarının oluşturduğu $\{u_i\}$ ortonormal kümesini ele alalım. Sistemin herhangi bir durumunu belirleyen ψ dalga fonksiyonunun bu bazda

$$\psi = \sum_i c_i u_i$$

olarak yazılabileceğini ve katsayıların

$$c_i = (u_i, \psi)$$

skaler çarpımlarıyla verildiğini görmüştük.

Öyle bir operatör düşünelim ki herhangi bir dalga fonksiyonuna etki ettiğinde, bu dalga fonksiyonunun sadece u_1 kısmını ayırıp versin. Başka bir deyişle, $\{u_i\}$ kümesinin süperpozisyonu olan bir ψ vektörünün u_1 baz vektörü doğrultusundaki izdüşümünü versin. Bu işi yapan operatöre, *izdüşüm* (projeksiyon) operatörü adı verilir.

Burada, Dirac notasyonuna alıştırma olmak üzere, izdüşüm operatörü için bra-ket vektörleri kullanarak bir ifade elde edelim.

Sistemin durumu $|\psi\rangle$ ket vektörü ve kullandığımız baz vektörleri $|u_n\rangle$ olsun. Bu bazda $|\psi\rangle$ nin açılımı

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle = \sum_n \langle u_n|\psi\rangle |u_n\rangle$$

olur. Bu $|\psi\rangle$ durumundan, örneğin $|u_1\rangle$ durumuna izdüşüm operatörü $\mathscr{P}_1$ ile gösterilirse

$$\mathscr{P}_1 |\psi\rangle = c_1 |u_1\rangle$$

olmalıdır. $c_1 = \langle u_1|\psi\rangle$ olduğu gözönüne alınırsa

$$\mathscr{P}_1 |\psi\rangle = (\langle u_1|\psi\rangle)|u_1\rangle = |u_1\rangle\langle u_1|\psi\rangle$$

yazılabilir. Bu eşitliğin iki tarafı karşılaştırıldığında, izdüşüm operatörünün

$$\boxed{\mathscr{P}_1 = |u_1\rangle\langle u_1|} \qquad (5.19)$$

olduğu görülür. (bu ifadenin $\langle u_1|u_1\rangle$ den farklı olduğuna tekrar dikkat çekelim).

İzdüşüm operatörü açısından bakıldığında, kapalılık bağıntısı

$$\sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = 1$$

ifadesi tüm baz vektörleri doğrultusundaki izdüşümler toplamının yine aynı vektörü vereceğini ifade eder.

PROBLEMLER

5.1 *Schwarz eşitsizliğini kullanarak, üçgen eşitsizliği denilen*

$$|\psi+\phi|^2 \leq (|\psi|+|\phi|)^2$$

bağıntısını ispat edin.

5.2 *Dalga fonksiyonu uzayında birbirine dik ψ_1 ve ψ_2 vektörleri veriliyor:*

$$(\psi_1, \psi_2) = 0$$

Bu iki vektör için Pisagor teoremi

$$|\psi_1+\psi_2|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$$

nin doğruluğunu gösterin.

5.3 *$[0,+\infty]$ aralığında verilen*

$$\psi_1 = e^{-x}, \qquad \psi_2 = xe^{-x}, \qquad \psi_3 = x^2e^{-x}$$

dalga fonksiyonlarını ortonormal hale getirin.

5.4 *Bir sonsuz kuyu potansiyelinde bulunan her 1000 adet parçacıktan 100 tanesinin $9E_1$ enerjiye, kalan 900 tanesinin de $64E_1$ enerjiye sahip oldukları biliniyor.*

(a) Bu sistemin durumunu veren dalga fonksiyonunu kurun ve normlayın.

(b) $[0,L/2]$ aralığında kaç tane parçacık olacağını hesaplayın.

5.5 *L genişliğindeki sonsuz kuyu potansiyelinde bir parçacığın E_2 enerjili özdurumda olduğu biliniyor. Kuyu genişliği aniden $2L$ ye çıkarılıyor. Yeni kuyuda parçacığın E_4 enerjili özdurumda bulunma olasılığı nedir? (Yol gösterme: Eski kuyudaki ψ_2 dalga fonksiyonunun yeni kuyu özfonksiyonları cinsinden süperpozisyonunu bulun).*

5.6 *Aşağıdaki operatörlerin hermitik eşleniğini alın ve bu operatörlerin hermitik olup olmadıklarını söyleyin:*

(a) $(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})$, (b) $\hat{A}+i\hat{B}$, (c) $i(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})$

5.7 *Aşağıda matris temsili verilen operatörün özdeğer ve özvektörlerini bulun:*

$$A = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

5.8 *(a) Aşağıda matris temsili verilen iki operatörün sıra değiştirdiğini gösterin. (b) Ortak özdeğer ve özvektörleri bulun.*

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix}, \qquad B = \begin{pmatrix} 3 & -2 \\ -2 & 6 \end{pmatrix}$$

5.9 *$\hat{A}$ ve $\hat{B}$ operatörleri $\hat{A}^2 = 0$, $\hat{A}\hat{A}^\dagger + \hat{A}^\dagger\hat{A} = 1$, $\hat{B} = \hat{A}^\dagger + \hat{A}$ bağıntılarıyla tanımlanıyor. $\hat{B}^2 = 1$ olduğunu gösterin.*

5.10 *xp_x operatörünün hermitik olmadığını, ancak $(xp_x + p_x x)/2$ operatörünün hermitik olduğunu gösterin (Bu tür fiziksel büyüklüklerin beklenen değerini hesaplamak için önce böyle simetrik hale getirmek gerekir.)*

5.11 *Hermitik bir $\hat{A}$ operatörü cinsinden*

$$\hat{U} = \frac{\hat{A} - i}{\hat{A} + i}$$

operatörü tanımlanıyor. $\hat{U}\hat{U}^\dagger = 1$ olduğunu gösterin.

5.12 *(a) $H = p^2/2m + V(x)$ hamiltonyeni için*

$$[x,[x,H]] = -\hbar^2/m$$

olduğunu gösterin.

(b) H operatörünün özdeğerleri E_n ve özvektörleri u_n ise

$$\sum_m (E_m - E_n)\,|x_{mn}|^2 = \hbar^2/2m$$

olduğunu gösterin. Burada $x_{mn} = (u_m, xu_n)$ matris elemanıdır.

5.13 *Antihermitik bir operatör $A^\dagger = -A$ olarak tanımlanır. Antihermitik operatörlerin özdeğerlerinin sanal olduğunu ispatlayın. Farklı özdeğerlere karşılık gelen özvektörler dik olur mu?*

5.14 *$[A,B] = 0$ ise $[A^n,B] = 0$ olacağını ispatlayın.*

5.15 *Herhangi üç operatör için*

$$[A,[B,C]] + [B,[C,A]] + [C,[A,B]] = 0$$

olduğunu gösterin.

5.16 *Açısal momentum vektörü $\vec{L}$ nin bileşenleri*

$$L_x = yp_z - zp_y\,, \qquad L_y = zp_x - xp_z\,, \qquad L_z = xp_y - yp_x$$

olarak tanımlanır. (a) Bu bileşenler arasındaki sıra değiştirme bağıntılarının

$$[L_x,L_y] = i\hbar L_z \qquad [L_y,L_z] = i\hbar L_x \qquad [L_z,L_x] = i\hbar L_y$$

olduğunu gösterin. (b) $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ operatörünün herbir bileşenle sıra değiştirdiğini ispatlayın.

5.17 $[A,B]=0$ *ve* $[A,C]=0$ *fakat* $[B,C]\neq 0$ *olduğu veriliyor. Bu durumda A nın özdurumlarının katlı olacağını gösterin.*

5.18 *(a) A ve B operatörlerinin x konum ve p momentum operatörleriyle sıra değiştirdikleri biliniyor. Buna göre*

$$[Ax,Bp]=i\hbar AB$$

olduğunu gösterin.

(b) 3-boyutlu uzayda $\vec{r}$ *ve* $\vec{p}$ *operatörleriyle sıra değiştiren* $\vec{A}=(A_1,A_2,A_3)$ *ve* $\vec{B}=(B_1,B_2,B_3)$ *vektör operatörleri için*

$$[\vec{A}.\vec{r},\vec{B}.\vec{p}]=i\hbar\vec{A}.\vec{B}$$

olduğunu gösterin.

5.19 *A ve B fiziksel büyüklükleri* hareket sabitleri *ise, yani* $[\hat{H},\hat{A}]=0$ *ve* $[\hat{H},\hat{B}]=0$ *ise, bunların komütatörü* $[\hat{A},\hat{B}]$ *ye karşılık gelen büyüklüğün de hareket sabiti olacağını ispatlayın (Poisson teoremi).*

5.20 *a genişliğindeki sonsuz kuyu potansiyelinde bir parçacığın dalga fonksiyonu*

$$\psi(x)=\sin\frac{2\pi x}{a}+2\sin\frac{3\pi x}{a}+2\sin\frac{5\pi x}{a}$$

olarak veriliyor.

(a) Bu dalga fonksiyonunu normlayın.

(b) Enerjinin beklenen değerini bulun.

(c) Parçacığın $[0,a/2]$ *aralığında bulunma olasılığını hesaplayın.*

BÖLÜM 6

3 BOYUTLU PROBLEMLER

6.1 KÜRESEL SİMETRİK POTANSİYEL

3 boyutlu uzayda bir $V(\vec{r}) = V(x,y,z)$ potansiyelinde hareket eden bir parçacığın toplam enerjisinin

$$E = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x,y,z)$$

ve buna karşılık gelen Schrödinger denkleminin

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}) \tag{6.1}$$

olduğunu Bölüm 3 de görmüştük. Verilen bir potansiyel fonksiyonu için bu, üç değişkenli bir kısmi diferansiyel denklem olur ki çözümü, tek boyutlu problemlere kıyasla, oldukça zordur.

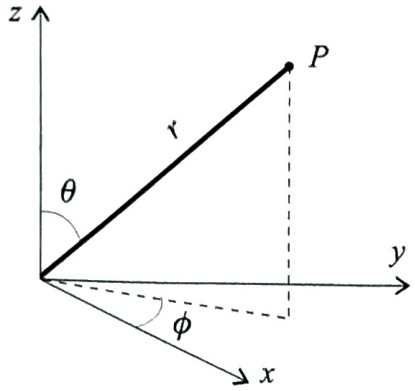
Ancak, fiziksel sistemlerde çok sık karşılaşılan bir durumda, potansiyel fonksiyonu küresel simetriye sahipse, yani

$$V(\vec{r}) = V(r) \qquad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

şeklinde sadece orijinden r uzaklığına bağlı ise, problemin çözümü biraz kolaylaşır. Örneğin, bir atomda $+Ze$ yüklü çekirdek etrafında hareket eden bir elektron için $V(r) = Ze^2/r$ Coulomb potansiyeli küresel simetriye sahiptir. Bir çekirdekteki nükleonlar için bazen kullanılan $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ harmonik salınıcı potansiyeli veya küresel kuyu potansiyeli yine küresel simetriye sahiptirler. Magnetik etkileşme dışında, bilinen tüm potansiyeller küresel simetriktirler.

Klasik mekanikten de bilindiği gibi, küresel simetrik bir potansiyelin uyguladığı kuvvet merkezseldir. Merkezsel bir kuvvetin en önemli özelliği ise, *açısal momentumun korunumu*dur. Kuantum mekaniğinde de görüleceği üzere, açısal momentum operatörü hamiltonyenle sıra değiştirme özelliğine sahip olur ve ortak özvektörlere sahiptirler.

Potansiyel fonksiyonunun ayrıntılarına girmeden önce, tüm küresel simetrik potansiyellerin ortak yönlerini inceleyelim.



Şekil 6.1: Kutupsal koordinatlar.

Küresel simetriyi en iyi ifade edebileceğimiz koordinat sistemi *kutupsal koordinatlar*dır. Şekil 6.1 de kutupsal koordinatlar (r,θ,ϕ) verilmiştir. Burada

r : radyal uzaklık

θ : kutup açısı

ϕ : azimut veya boylam açısı

olup, (x,y,z) kartezyen koordinatlarıyla ilişkileri şöyledir:

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned} \tag{6.2}$$

Yukardaki Schrödinger denklemini kutupsal koordinatlarda yazabilmek için önce kısmi türevleri (r,θ,ϕ) değişkenleri cinsinden yazmak gerekir. Kolay fakat uzun olan bu işlemi $\partial\psi/\partial x$ operatörü için hesaplayalım:

x değişkeni ile (r,θ,ϕ) değişkenleri arasında zincir kuralı uygulanırsa

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{\partial\psi}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial\psi}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial x} + \frac{\partial\psi}{\partial\phi}\frac{\partial\phi}{\partial x}$$

Görüldüğü gibi, her kutupsal (r,θ,ϕ) koordinatının her (x,y,z) koordinatına göre kısmi türevini bulmak gerekir. Bu amaçla, yukardaki koordinat dönüşümleri kullanılarak, (r,θ,ϕ) değişkenleri (x,y,z) cinsinden yazılır:

$$\begin{aligned} r^2 &= x^2+y^2+z^2 \\ \cos\theta &= \frac{z}{r} \\ \tan\phi &= \frac{y}{x} \end{aligned}$$

Bu ifadelerin diferansiyelleri alınır:

$$\begin{aligned} r\,dr &= x\,dx+y\,dy+z\,dz \\ -\sin\theta\,d\theta &= \frac{r\,dz-z\,dr}{r^2} = -\frac{zx\,dx+zy\,dy+(z^2-r^2)\,dz}{r^3} \\ \frac{1}{\cos^2\phi}\,d\phi &= \frac{x\,dy-y\,dx}{x^2} \end{aligned}$$

Bu bağıntılar yardımıyla, istenilen her kısmi türev kolayca elde edilebilir. Örneğin, $\partial r/\partial x$ kısmi türevini bulmak için, 1. bağıntıda y ve z sabit tutulursa ($dy = dz = 0$)

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin\theta\cos\phi$$

bulunur. Benzer şekilde, 2. ve 3. bağıntılardan $\partial\theta/\partial x$ ve $\partial\phi/\partial x$ kısmi türevleri bulunur:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\theta}{\partial x} &= \frac{zx}{r^3\sin\theta} = \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\\ \frac{\partial\phi}{\partial x} &= -\frac{y}{x^2}\cos^2\phi = -\frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\end{aligned}$$

Böylece, aranan $\partial\psi/\partial x$ kısmi türevi yazılabilir:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi\,\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\,\frac{\partial\psi}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\,\frac{\partial\psi}{\partial\phi}$$

Buradan devam edilerek, $\partial^2\psi/\partial x^2, \partial^2\psi/\partial y^2, \partial^2\psi/\partial z^2$ ifadeleri, uzun fakat kolay bir yolla bulunmuş olurlar. Bu işlemler sonucu, kutupsal koordinatlarda Schrödinger denkleminin ifadesi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\psi + V(r)\psi = E\psi \tag{6.3}$$

olarak yazılabilir. ψ dalga fonksiyonu (r,θ,ϕ) koordinatlarının bir fonksiyonu olur.

Potansiyelin sadece r değişkenine bağlı oluşu nedeniyle, değişken ayrımı yöntemini burada uygulayabiliriz. Bu amaçla

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\,Y(\theta,\phi)$$

şeklinde bir çözüm arayalım. Kısmi türevleri aldıktan sonra, eşitliğin iki tarafı $(R\,Y)$ ile bölünür ve r ye bağlı terimler bir tarafa ayrılırsa

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}[E - V(r)] = -\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]$$

olur. Sol tarafta yalnız r değişkenine bağlı bir ifade, sağ tarafta yalnız (θ,ϕ) değişkenlerine bağlı bir ifadeye eşit olmaktadır. Bu eşitliği her (r,θ,ϕ) değeri için sağlayabilmenin tek yolu, iki tarafın da aynı bir λ sabitine eşit olmasıdır. Buradan

$$\begin{aligned}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}[E - V(r)]R - \lambda R &= 0\\ \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} + \lambda Y &= 0\end{aligned} \tag{6.4}$$

denklemleri bulunur.

Bu denklemlerden birincisi sadece r koordinatına bağlı olup *Radyal Schrödinger denklemi* adını alır. Ayrıntılı çözümü bulmak için $V(r)$ potansiyelinin verilmesi lazımdır.

İkinci denklemde ise $V(r)$ potansiyeli yoktur. O halde, *tüm küresel simetrik potansiyeller için, dalga fonksiyonunun açısal bağlılığı aynı* $Y(\theta,\phi)$ *fonksiyonu ile belirlenmiş olacaktır.*

Önce bu açısal denklemin çözümüne bakalım.

6.2 AÇISAL MOMENTUM ÖZFONKSİYONLARI

Yukarda $Y(\theta,\phi)$ fonksiyonunun sağladığı denklem

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]Y=\lambda Y \tag{6.5}$$

şeklinde yazıldığında, köşeli parantez içindeki operatörün özdeğer denklemi görüntüsün-dedir. Gerçekten de, bu operatör

$$L^2=(\vec{r}\times\vec{p})^2$$

açısal momentumun karesi operatörünün kutupsal koordinatlarda yazılmış halidir. Bunu görmek için, $\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$ operatörünün

$$L_x=yp_z-zp_y,\qquad L_y=zp_x-xp_z,\qquad L_z=xp_y-yp_x$$

bileşenlerinde, önce herbir momentum bileşenini $p_i\to-i\hbar\partial/\partial x_i$ operatörü şeklinde yazıp daha sonra, yukarda gösterildiği gibi, kutupsal koordinatlara geçilirse

$$\begin{aligned}L_x &= i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\\ L_y &= i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\\ L_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\end{aligned}$$

olur. Buradan $L^2=L_x^2+L_y^2+L_z^2$ operatörü

$$L^2=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

olarak bulunur.

O halde, yukardaki açısal denklemi L^2 operatörünün özdeğer denklemi şeklinde yazabiliriz:

$$L^2\,Y(\theta,\phi)=\lambda\hbar^2\,Y(\theta,\phi)$$

Bulacağımız $Y(\theta,\phi)$ fonksiyonları açısal momentum operatörünün özfonksiyonları olacaktır.

Tekrar değişken ayrımı tekniğine başvurup bu iki açısal değişkeni de ayıralım:

$$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\,\Phi(\phi)$$

Kısmi türevler alınıp her terim $\Theta\Phi$ faktörüne bölünür ve sadece ϕ ye bağlı terimler eşitliğin diğer tarafına geçirilirse

$$\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\lambda\sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}$$

bulunur. Yine, eşitliğin bir tarafı sadece θ değişkenine, diğer tarafı da sadece ϕ ye bağlı olduğundan, her iki taraf da aynı bir sabite eşit olmalıdır. Bu sabite m^2 diyelim (reel ve pozitif olacağı daha sonra görülecektir). Elde edilen iki denklem

$$\begin{aligned}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+m^2\Phi &= 0\\ \frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta &= 0\end{aligned}$$

olur. Birinci denklemin çözümü doğrudan yazılabilir:

$$\Phi(\phi)=Ae^{im\phi}$$

ϕ açısı $[0,2\pi]$ arasında değiştiğinden, dalga fonksiyonunun tek değerli olabilmesi için

$$\begin{aligned}\Phi(\phi+2\pi) &= \Phi(\phi)\\ Ae^{im(\phi+2\pi)} &= Ae^{im\phi}\\ e^{2im\pi} &= 1\end{aligned}$$

olmalıdır. Bu koşulu sağlayabilmesi için m değerinin sıfır veya tamsayı olması gerekir. Sonuç olarak, dalga fonksiyonunun ϕ koordinatına bağlı kısmının çözümü bir m kuantum sayısına bağlı olarak yazılabilir:

$$\Phi_m(\phi)=Ae^{im\phi}\qquad(m=0,\pm1,\pm2,\pm3,\ldots)\tag{6.6}$$

Dikkat edilirse, $\Phi(\phi)$ fonksiyonu, açısal momentum operatörünün z-bileşeninin özfonksiyonudur. Gerçekten de, yukarda kutupsal koordinatlarda verilen L_z ifadesi bu fonksiyona etki ettirilirse

$$\begin{aligned}L_z\Phi_m &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\Phi=-i\hbar A\frac{\partial}{\partial\phi}e^{im\phi}=m\hbar Ae^{im\phi}\\ L_z\Phi_m &= m\hbar\Phi_m \qquad \text{bulunur.}\end{aligned}$$

Bu sonuca göre, *L_z operatörünün özdeğerleri $m\hbar$, özfonksiyonları da Φ_m fonksiyonlarıdır. Fiziksel açıdan bakıldığında, açısal momentumun z-bileşeni ölçüldüğünde $\hbar$ nın tam katları bulunacaktır.* Böylece, enerjiden sonra, açısal momentumun z-bileşeninin kuantalanması da sağlanmış olur.

6.2.1 LEGENDRE POLİNOMLARI

Şimdi $\Theta(\theta)$ fonksiyonunu arayalım. Yukarda verilen denklemi tekrar yazalım:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta=0$$

Bu denklem yeni bir ($\mu = \cos\theta$) değişkeni cinsinden yazıldığında

$$(1-\mu^2)\frac{d^2\Theta}{d\mu^2} - 2\mu\frac{d\Theta}{d\mu} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-\mu^2}\right)\Theta = 0 \qquad (m \text{ tamsayı})$$

olur. θ açısı $[0,\pi]$ aralığında değiştiği için, μ değişkeni $[-1,1]$ aralığında tanımlıdır.

Önce, uygulamadaki önemi bakımından, ($m=0$) özel durumunu inceleyelim. Bu özel çözümleri $P(\mu)$ ile gösterirsek

$$(1-\mu^2)\frac{d^2P}{d\mu^2} - 2\mu\frac{dP}{d\mu} + \lambda P = 0 \tag{6.7}$$

olur. *Legendre diferansiyel denklemi* olarak bilinen bu denklem *kuvvet serisi* yöntemiyle çözülebilir. Aranan çözümü, μ değişkeninin bir kuvvet serisi olarak yazalım:

$$P(\mu) = c_0 + c_1\mu + c_2\mu^2 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\mu^n$$

Gerekli terimler hesaplanırsa

$$\begin{aligned}
P'(\mu) &= c_1 + 2c_2\mu + 3c_3\mu^2 + \cdots \\
2\mu P' &= 2(c_1\mu + 2c_2\mu^2 + 3c_3\mu^3 + \cdots) = \sum_n 2nc_n\mu^n \\
P'' &= 1.2c_2 + 2.3c_3\mu + 3.4c_4\mu^2 + \cdots \\
(1-\mu^2)P'' &= (1.2c_2 + 2.3c_3\mu + \cdots) - (1.2c_2\mu^2 + 2.3c_3\mu^3 + \cdots \\
&= \sum_n (n+1)(n+2)c_{n+2}\mu^n - \sum_n (n-1)nc_n\mu^n
\end{aligned}$$

Bu ifadeler diferansiyel denklemde kullanılıp, bütün terimler aynı bir toplam içinde yazılırsa

$$\sum_n [(n+1)(n+2)c_{n+2} - (n-1)nc_n - 2nc_n + \lambda c_n]\,\mu^n = 0$$

olur. Her μ kuvvetinin katsayısı sıfıra eşitlendiğinde bir tekrarlama bağıntısı elde edilir:

$$(n+1)(n+2)c_{n+2} - (n-1)nc_n - 2nc_n + \lambda c_n = 0$$

veya

$$c_{n+2} = \frac{n(n+1)-\lambda}{(n+1)(n+2)}c_n$$

c_1 ve c_2 gibi iki başlangıç katsayısı verilirse, tüm c_n katsayıları bulunup seri çözümü yazılabilir.

Ancak, bu sonsuz terimli seri yakınsak mıdır? Bunu anlamak için katsayılara *oran testi* uygulanırsa

$$\lim_{n\to\infty}\frac{c_{n+2}}{c_n} = \lim_{n\to\infty}\frac{n(n+1)-\lambda}{(n+1)(n+2)} = 1$$

bulunur ki bu, serinin ıraksak olduğunu ve dalga fonksiyonu olarak kabul edilemiyeceğini gösterir. Bu sorunu aşmanın tek yolu serinin sonlu terimde kalması, yani bir polinom olmasıdır.

(ii) Özel değerler:

$$P_l(1) = 1$$
$$P_l(-\mu) = (-1)^l P_l(\mu)$$

Bu son ifade Legendre polinomlarının l indisinin tek veya çift oluşuna göre, tek veya çift pariteli olduklarını gösterir.

(iii) Tekrarlama bağıntısı:

$$(l+1)P_{l+1} = (2l+1)\mu P_l - lP_l \tag{6.8}$$

(iv) Türev bağıntısı:

$$(1-\mu^2)P_l' = lP_{l-1} - l\mu P_l$$

(v) Üretici fonksiyon:

$$G(\mu,s) = (1-2\mu s+s^2)^{-1/2} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\mu)\, s^l \qquad (|s|<1)$$

L^2 operatörünün özdeğerlerinin $\lambda\hbar^2$ olduğu hatırlanırsa, sonuç olarak ($m=0$ için)

$$L^2\, P_l(\cos\theta) = l(l+1)\hbar^2\, P_l(\cos\theta) \qquad (l=0,1,2,\ldots) \tag{6.9}$$

yazılabilir. Bu ifade, açısal momentumun karesinin de kuantize olduğunu gösterir.

6.2.2 KÜRESEL HARMONİKLER

Açısal denklemde $m \neq 0$ olduğunda çözümler farklı, ancak yine Legendre polinomları ailesinden olurlar.

Önce, *bağlı (asosye) Legendre polinomlarını* tanımlayalım:

$$P_l^m(\mu) = (1-\mu^2)^{m/2}\frac{d^m}{d\mu^m}P_l(\mu) \qquad (m \geq 0)$$
$$P_l^m(\mu) = (-1)^m\frac{(l+m)!}{(l-m)!}P_l^{|m|}(\mu) \qquad (m<0) \tag{6.10}$$

l ve m gibi iki indisle tanımlanan bu polinomlarda ($m>l$) olduğunda türevler sıfır olacağından, m indisi doğal olarak $[-l,+l]$ aralığında değerler alabilir.

İlk birkaç bağlı Legendre polinomunu yazalım (P_l^0 lar bildiğimiz Legendre polinomlarıdır):

$$P_0 = 1$$
$$P_1^1 = -\sin\theta \qquad P_1^{-1} = \frac{1}{2}\sin\theta$$
$$P_2^2 = 3\sin^2\theta \qquad P_2^1 = -3\sin\theta\cos\theta$$
$$P_2^{-2} = \frac{1}{8}\sin^2\theta \qquad P_2^{-1} = \frac{3}{2}\sin\theta\cos\theta$$

Denklem 6.7 ile verilen Legendre diferansiyel denkleminin m defa türevini alalım. Gerektiği yerde P_l^m ifadesi kullanıldığında

$$(1-\mu^2)\frac{d^2P_l^m}{d\mu^2} - 2\mu\frac{dP_l^m}{d\mu} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-\mu^2}\right]P_l^m = 0 \tag{6.11}$$

bulunur. Bu denklem, çözmeye çalıştığımız $\Theta(\theta)$ denkleminin $\lambda = l(l+1)$ konulmuş hali olduğundan çözüm bulunmuş demektir:

$$\Theta_l^m(\theta) = P_l^m(\cos\theta) \tag{6.12}$$

Nihayet, başlangıçta yola çıktığımız açısal denklemin $Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$ çözümlerini yazabiliriz:

$$\boxed{Y_l^m(\theta,\phi) = N_{lm}P_l^m(\cos\theta)\,e^{im\phi} \qquad \begin{cases} l = 0,1,2,\ldots \\ m = -l,\ldots,-1,0,1,\ldots,l \end{cases}} \tag{6.13}$$

Kutupsal koordinatlarda hacım elemanı $d^3r = r^2dr\sin\theta\ d\theta\ d\phi$ olduğundan, açısal fonksiyonların normlanması

$$\int_0^{\pi} d\theta\ \sin\theta \int_0^{2\pi} d\phi\ |Y_l^m(\theta,\phi)|^2 = 1$$

olarak alınırsa, normlama sabiti hesaplanır:

$$N_{lm} = (-1)^m\left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}$$

Hem L^2 ve hem de L_z operatörünün özfonksiyonları olan bu Y_l^m fonksiyonları *Küresel Harmonikler* adıyla bilinirler.

$$\begin{aligned} L^2\,Y_l^m(\theta,\phi) &= l(l+1)\hbar^2\,Y_l^m(\theta,\phi) \\ L_z\,Y_l^m(\theta,\phi) &= m\hbar\,Y_l^m(\theta,\phi) \end{aligned} \tag{6.14}$$

Küresel harmoniklerden ilk birkaçı şöyle sıralanabilir:

$$Y_0^0 = \left[\frac{1}{4\pi}\right]^{1/2} \qquad Y_1^0 = \left[\frac{3}{4\pi}\right]^{1/2}\cos\theta$$

$$Y_1^1 = -\left[\frac{3}{8\pi}\right]^{1/2}\sin\theta\,e^{i\phi} \qquad Y_1^{-1} = \left[\frac{3}{8\pi}\right]^{1/2}\sin\theta\,e^{-i\phi}$$

$$Y_2^0 = \left[\frac{5}{16\pi}\right]^{1/2}(3\cos^2\theta - 1)$$

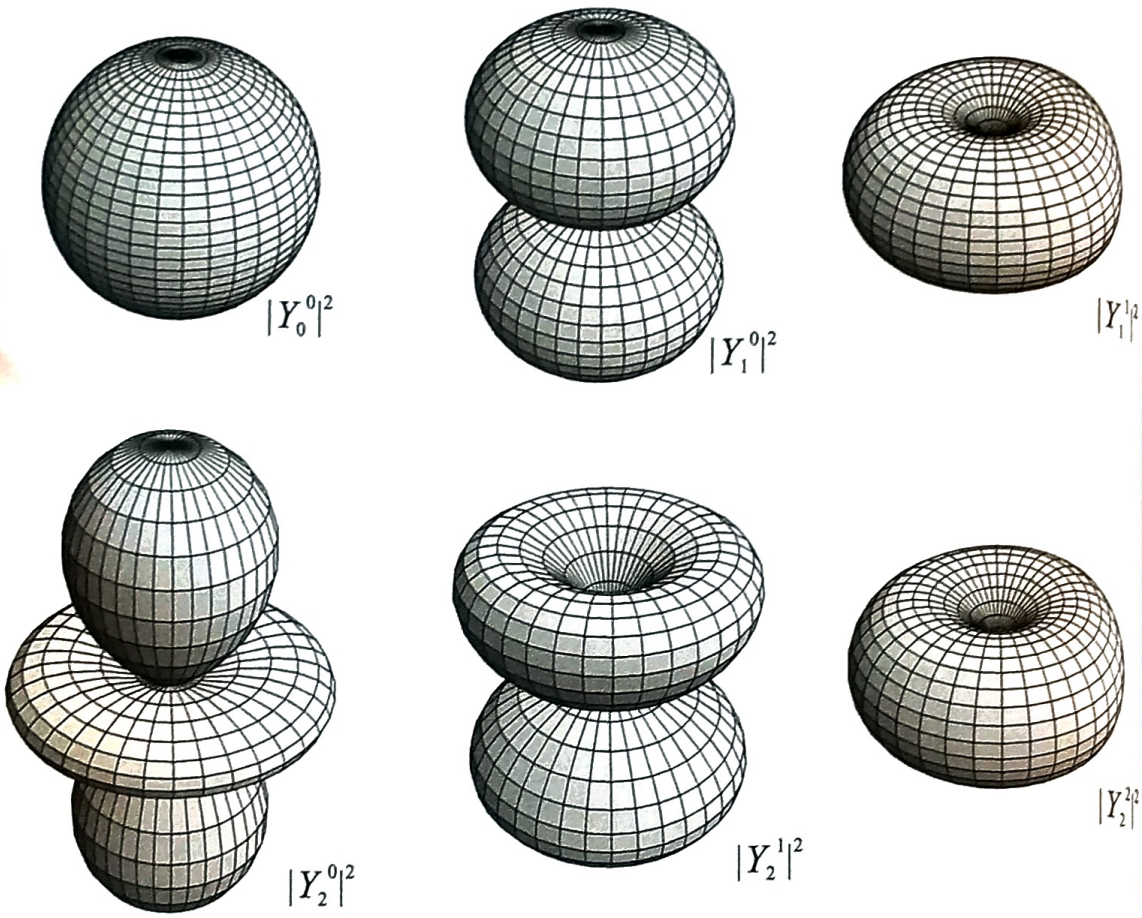
$$Y_2^1 = -\left[\frac{15}{16\pi}\right]^{1/2}\sin\theta\cos\theta\,e^{i\phi} \qquad Y_2^{-1} = \left[\frac{15}{16\pi}\right]^{1/2}\sin\theta\cos\theta\,e^{-i\phi}$$

$$Y_2^2 = \left[\frac{15}{32\pi}\right]^{1/2}\sin^2\theta\,e^{2i\phi} \qquad Y_2^{-2} = \left[\frac{15}{32\pi}\right]^{1/2}\sin^2\theta\,e^{-2i\phi}$$

Özel olarak, $m = 0$ için, Legendre polinomlarını buluruz:

$$Y_l^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, P_l(\cos\theta) \tag{6.15}$$

Sabit bir r uzaklığında olasılık yoğunluğu $|Y_l^m(\theta,\phi)|^2$ ile verilir (Şekil 6.3).



Şekil 6.3: $l = 0, 1, 2$ için $|Y_l^m|^2$ lerin kutupsal grafikleri.

Küresel harmonikler atom ve molekül fiziğinde önemli bir yer tutarlar. Potansiyel fonksiyonu ne olursa olsun, parçacığın açısal konumu ve olasılığı hep bu fonksiyonlarla verilecektir. Küresel harmoniklerin özelliklerinden çıkarılacak başlıca sonuçları şöyle sıralayabiliriz:

- l indisine *yörünge kuantum sayısı* ve m indisine *magnetik kuantum sayısı* denir. Atomik fizikte kullanılan notasyona göre, $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$ kuantum sayılı durumlara $s, p, d, f, \ldots$ yörüngeleri adı verilir.
- $|Y_l^m|^2$ olasılık yoğunluğu ϕ açısından bağımsızdır. Buna göre, verilen bir z ekseni etrafında dönme simetrisi her yörünge için vardır.
- s yörüngelerinde ($l = 0$), parçacığın açısal olasılığı (θ ve ϕ) den bağımsız olup her yönde aynıdır. S yörüngeleri gerçekten küresel simetrik (veya, izotropik)tirler.
- Belirli bir l değeri için, $\pm m$ durumlarında bulunma olasılıkları aynıdır.

- Belirli bir l değeri için, m kuantum sayısı arttıkça olasılık, $\theta = 0$ olan z-ekseninden uzaklaşıp $\theta = 90^\circ$ olan xy-düzleminde yoğunlaşır. Klasik olarak düşünülürse, parçacık z-ekseni üzerindeyse($x = y = 0$) açısal momentumun $L_z = xp_y - yp_x$ bileşeninin sıfır olması doğaldır. Öte yandan, xy-eksenindeki bir yörünge L_z bileşeninin maksimum olmasını sağlar.

- Gerçekte, tek başına bir atom için, 3-boyutlu uzayda hangi yönün z ekseni olacağı belirsizdir. Ancak, bir dış etken varsa (örneğin, bir magnetik alan), bunun yönü uzayda tercihli bir doğrultu oluşturur. L_z nin özdeğerlerine magnetik kuantum sayısı denmesinin nedeni budur.

- m kuantum sayısının maksimum değeri l olduğu için L_z^2 operatörünün maksimum özdeğeri $l^2\hbar^2$ olabilir. Oysa, L^2 operatörünün maksimum özdeğeri $l(l+1)\hbar^2$ dir. Bu bir çelişki gibi görünürse de, belirsizlik ilkesine göre doğrudur. Eğer, L_z^2 nin maksimum değeri $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ ye eşit olsaydı, o zaman $L_x = L_y = 0$ olurdu. Yani, *her üç bileşen aynı anda kesin olarak bilinmiş olurlardı.* Oysa, açısal momentum operatörlerinin bileşenleri sıra değiştirme özelliğine sahip değildirler: $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$

Alıştırma 6.1 : **Rijit dönücü.** *Sabit bir eksen etrafında eylemsizlik momenti I olan rijit bir cisim bu eksen etrafında serbestçe dönebiliyor. Bu cismin enerji özdurumlarını ve özfonksiyonlarını bulun.*

Çözüm : Cismin hareketini etkileyen bir kuvvet olmadığı için toplam enerjisi sadece kinetik enerjiden ibarettir. Eylemsizlik momenti I olan ve L açısal momentumuyla dönen bir cismin kinetik enerjisi $L^2/2I$ olur. O halde, cismin hamiltonyeni $H = L^2/2I$ alınır ve Schrödinger denklemi yazılır:

$$\begin{aligned} H\psi &= E\psi \\ \frac{L^2}{2I}\psi &= E\psi \end{aligned}$$

Bu denklem, $1/2I$ sabit faktörü dışında L^2 operatörünün özdeğer denklemidir. O halde, özfonksiyonlar küresel harmoniklerden ibaret olup, enerji özdeğerleri ise, açısal momentumun karesinin özdeğerlerine orantılı olur:

$$\begin{aligned} \psi_{lm} &= Y_l^m(\theta,\phi) \\ E_l &= \frac{l(l+1)}{2I}\hbar^2 \qquad (l = 0,1,2,\ldots) \quad \text{olur.} \end{aligned}$$

Rijit dönücü denilen bu sistem, diatomik moleküllerin hareketini temsil eden yaklaşık bir model olarak kullanılır.

Alıştırma 6.2 : *Parite operatörü $\mathscr{P}$ nin kutupsal koordinatlarda bir fonksiyona etkisi nasıl olur? Buna göre*

$$\mathscr{P}Y_l^m = (-1)^l Y_l^m$$

yani, küresel harmoniklerin tek veya çift pariteli oluşunun sadece l kuantum sayısına bağlı olduğunu gösterin.

Çözüm : Parite operatörü $(x,y,z \to -x,-y,-z)$ etkisiyle tanımlanmıştı. Önce z nin kutupsal koordinatlardaki ifadesine bakalım:

$$z = r\cos\theta$$

r mutlaka pozitif olduğuna göre, $[0,\pi]$ aralığında değişen θ kutup açısı $\cos\theta$ yı nasıl tersine çevirebilir? Şekil 6.1 deki çizim gözönüne alınırsa $(\theta \to \pi - \theta)$ olması gerektiği ortaya çıkar. Bu değişikliği x ve y nin kutupsal ifadelerinde yerine koyarsak, ikisinde de $\sin(\pi-\theta) = \sin\theta$ olacağından değerleri değişmez. O halde $[0,2\pi]$ aralığında değişebilen ϕ boylam açısı $(\phi \to \phi + \pi)$ olarak değişmelidir ki hem $\sin\phi$ ve hem de $\cos\phi$ işaret değiştirebilsin. Sonuç olarak, parite operatörünün bir $\psi(r,\theta,\phi)$ dalga fonksiyonuna etkisi

$$\mathscr{P}\psi(r,\theta,\phi) = \psi(r,\pi-\theta,\phi+\pi) \qquad \text{olur.}$$

(b) Küresel harmoniklerin tanımını tekrar yazalım:

$$Y_l^m(\theta,\phi) = N_{lm}P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}$$

$\phi \to \phi + \pi$ olduğunda üstel fonksiyonun değişimi

$$e^{im(\phi+\pi)} = e^{im\pi}e^{im\phi} = (-1)^m e^{im\phi}$$

olduğundan, küresel harmonik $(-1)^m$ ile çarpılmış olur.

P_l^m bağlı Legendre polinomlarının tanımında:

$$P_l^m(\mu) = (1-\mu^2)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{d\mu^{|m|}}P_l(\mu)$$

$(\theta \to \pi - \theta)$ değişimi yapıldığında, $(\mu = \cos\theta \to -\mu)$ ve $P_l(-\mu) \to (-1)^l P_l(\mu)$ olduğunu biliyoruz. Ancak, m kere türev alındıktan sonra elde edilen bağlı Legendre polinomunun değişimi $(-1)^{(l-m)}P_l^m$ olacaktır.

Bu iki katkının çarpımı $(-1)^m \times (-1)^{l-m} = (-1)^l$ olduğundan sonuç olarak

$$\mathscr{P}Y_l^m(\theta,\phi) = (-1)^l Y_l^m$$

olur. O halde, küresel harmoniklerin paritesi l kuantum sayısına göre tek veya çifttir.

6.3 RADYAL SCHRÖDİNGER DENKLEMİ

6.3.1 GENEL ÖZELLİKLER

Tüm küresel simetrik potansiyeller için, dalga fonksiyonunun açısal kısmının $Y_l^m(\theta,\phi)$ olduğunu bildikten sonra, şimdi radyal Schrödinger denkleminde $\lambda = l(l+1)$ özdeğerini yerine koyarsak

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]R(r) = 0 \qquad (6.16)$$

olur. Bu denklemin çözümü için $V(r)$ potansiyelinin verilmiş olması gerekir.

Potansiyel fonksiyonunun ayrıntılarına girmeden önce, bu denklemin genel özelliklerini gözden geçirelim:

- Radyal denklemde, $V(r)$ potansiyeline ek olarak $l(l+1)\hbar^2/(2mr^2)$ gibi daima l ye bağımlı bir terim olması dikkat çekicidir. *Merkezkaç potansiyeli* olarak bilinen bu terim $l \neq 0$ için ve $r \to 0$ olduğunda önem kazanır.

- R dalga fonksiyonunun sınır koşulları kartezyen koordinatlardakinden biraz farklıdır: 3-boyutta hacım elemanı olan $d^3r = r^2 dr\, \sin\theta\, d\theta\, d\phi$ nin açısal kısmı küresel harmoniklerin normlanmasında kullanıldığı için radyal dalga fonksiyonlarının normlanması

$$\int_0^\infty dr\, r^2 |R(r)|^2 = 1 \tag{6.17}$$

olacaktır. Normun sonlu olması için sınır değerlerinde $R(r)$ fonksiyonunun sıfıra gitmesi yeterli olmaz, doğru limit

$$\lim_{r\to\infty} [r\, R(r)] \to 0 \qquad \text{olmalıdır.} \tag{6.18}$$

- $\chi(r) = rR(r)$ bağıntısıyla yeni bir $\chi(r)$ fonksiyonu tanımlarsak radyal Schrödinger denklemi daha basit bir ifadeye dönüşür:

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E-V) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi = 0 \tag{6.19}$$

$l \neq 0$ için bu denklemin $r \to 0$ limitine bakalım: Merkezkaç terimin paydasındaki r^2 den dolayı diğer terimleri bastırır ve yaklaşık olarak

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\chi \approx 0 \qquad (r \to 0)$$

yazılabilir. Bu denklemin çözümleri ise

$$\chi(r) = \text{sabit} \times r^{l+1} \qquad \text{ve} \qquad \chi(r) = \text{sabit} \times r^{-l}$$

olur. İkinci çözüm $r \to 0$ da ıraksak olduğundan kabul edilemez. O halde, potansiyel fonksiyonu ne olursa olsun, radyal dalga fonksiyonunun $r \to 0$ davranışı

$$\lim_{r\to 0}\chi(r) \to r^{l+1} \qquad \text{veya} \qquad \lim_{r\to 0} R(r) \to r^l \qquad \text{olmalıdır.}$$

- $l = 0$ olduğunda (s-yörüngeleri) radyal dalga fonksiyonunda merkezkaç terim kalkar ve $\chi(r)$ fonksiyonu için yazdığımız radyal denklem, tek boyutlu uzayda Schrödinger denklemine indirgenmiş olur. Ancak, bulunan çözümler için yine de ($\lim_{r\to 0} rR = 0$) olmalıdır.

6.3.2 UYGULAMALAR

Daha önemli olan hidrojen atomu problemine geçmeden önce, bu kısımda diğer üç boyutlu problemleri kısaca inceleyelim.

3-BOYUTLU SERBEST PARÇACIK

En basit durum olan $V(r) = 0$, yani serbest parçacık için kartezyen koordinatlarda çözümün düzlem dalga olduğunu biliyoruz:

$$\psi(x,y,z) = Ae^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} = Ae^{i\vec{k}.\vec{r}}$$

Bu basit çözüm dururken, neden kutupsal koordinatlarda çok daha karmaşık bir çözüm arıyoruz? Yukardaki düzlem dalga hem enerji ve hem de momentumun özfonksiyonudur. Ancak, açısal momentumun özfonksiyonu değildir. Bazı uygulamalarda (örneğin, saçılma teorisinde), düzlem dalga için bile açısal momentumun özfonksiyonları ile çalışmak kolaylık sağlar. Kutupsal koordinatlardaki çözümler doğal olarak hem enerji ve hem de açısal momentumun özfonksiyonları olurlar.

Serbest parçacık için $V = 0$ alınıp $k^2 = 2mE/\hbar^2$ sabiti tanımlanır ve yukardaki Radyal Schrödinger denklemi r^2 ile bölünürse

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r) = 0$$

$\rho = kr$ gibi yeni bir boyutsuz değişken alındığında radyal denklem

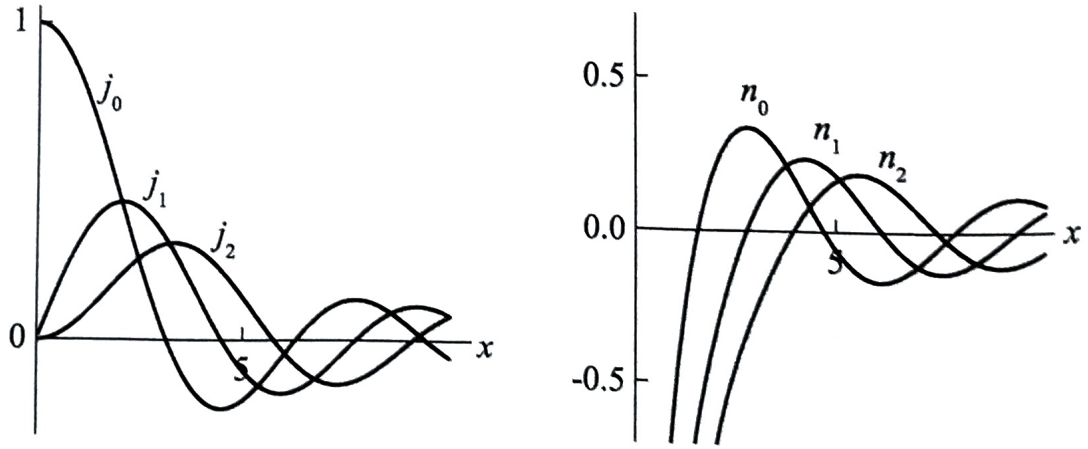
$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R = 0 \tag{6.20}$$

olur. Bu denklem *Bessel diferansiyel denklemi* olarak bilinir.

Bessel diferansiyel denkleminin birbirinden bağımsız iki grup çözümü vardır:

(a) $\rho \to 0$ da ρ^l olarak sonlu davranan ve $j_l(\rho)$ ile gösterilen çözümlere *küresel Bessel fonksiyonları*,

(b) $\rho \to 0$ da $1/\rho^{l+1}$ olarak ıraksayan ve $n_l(\rho)$ ile gösterilen çözümlere *küresel Neumann fonksiyonları* denir.



Şekil 6.4: Küresel Bessel ve Neumann Fonksiyonları.

Şekil 6.4 de grafiği verilen ilk birkaç küresel Bessel fonksiyonları şöyle sıralanabilir:

$$j_0(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho} \qquad n_0(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho}$$

$$j_1(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho} \qquad n_1(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho^2} - \frac{\sin\rho}{\rho}$$

$$j_2(\rho) = \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\sin\rho - \frac{3}{\rho^2}\cos\rho \qquad n_2(\rho) = -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\cos\rho - \frac{3}{\rho^2}\sin\rho$$

Küresel Bessel Fonksiyonlarının Özellikleri

(i) Asimtotik davranış: Küçük ρ değerleri için

$$\lim_{\rho\to 0} j_l(\rho) \simeq \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \qquad \lim_{\rho\to 0} n_l(\rho) \simeq -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}$$

Burada $(2l\pm 1)!! = 1.3.5\ldots(2l\pm 1)$ olarak tanımlanmıştır.

Büyük ρ değerleri için

$$\lim_{\rho\to\infty} j_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho}\sin[\rho - l\pi/2] \qquad \lim_{\rho\to\infty} n_l(\rho) \simeq -\frac{1}{\rho}\cos[\rho - l\pi/2]$$

(ii) Tekrarlama bağıntısı: ($f_l = j_l$ veya n_l) alınırsa

$$f_{l-1}(\rho) + f_{l+1}(\rho) = \frac{2l+1}{\rho} f_l(\rho)$$

bağıntısı her ikisi için de geçerlidir.

(iii) Diklik bağıntısı: ($\rho = kr$) için

$$\int_0^\infty dr\, r^2\, j_l(kr) j_l(k'r) = \frac{\pi}{2k^2}\delta(k-k')$$

(iv) Türev bağıntıları:

$$\frac{dj_l(\rho)}{d\rho} = \begin{cases} j_{l-1}(\rho) - \frac{l+1}{\rho} j_l(\rho) \\ -j_{l+1}(\rho) + \frac{l}{\rho} j_l(\rho) \end{cases}$$

Bu çözümlerden n_l fonksiyonlarının $r = 0$ da ıraksak olduğunu gördükten sonra, serbest parçacık için radyal denklemin çözümünü

$$R_l(r) = A\, j_l(kr) \qquad (k^2 = 2mE/\hbar^2) \tag{6.21}$$

ve komple dalga fonksiyonunu

$$\boxed{\psi_{klm}(r,\theta,\phi) = A\, j_l(kr)\, Y_l^m(\theta,\phi)} \tag{6.22}$$

olarak yazabiliriz.

Bu dalga fonksiyonunda $p = \hbar k$ momentumu sürekli olarak değiştiği için enerji her değeri alabilir. Ancak, momentumun sadece büyüklüğü verilmiştir. $\vec{k}$ vektörünün yönü (yani, parçacığın ilerleme yönü) hakkında bilgimiz yoktur. Buna karşılık, parçacığın açısal momentumu l kuantum sayısı ile belirlidir.

3-BOYUTLU SONSUZ KUYU POTANSİYELİ

Tek boyutta etra ıca işlediğimiz sonsuz kuyu potansiyelinin 3-boyutlu ifadesi

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r \le a \\ +\infty & r > a \end{cases}$$

olur.

$r \leq a$ için $V = 0$ olduğundan, kuyu içinde serbest parçacık çözümü doğrudan yazılabilir:

$$R_l(r) = A_l\, j_l(kr) \qquad (k^2 = 2mE/\hbar^2)$$

Bu çözümlerin $r = 0$ da yakınsak olduğu biliniyor. $r = a$ sınırında ise potansiyel sonsuz olduğundan

$$j_l(ka) = 0$$

sınır koşulu olmalıdır. Bu sonuca göre, Bessel fonksiyonlarının kökleri enerji özdeğerlerini verecektir. Herbir l indisli Bessel fonksiyonunun n.kökünü ρ_{nl} ile gösterirsek

$$\begin{aligned} k_{nl}\, a &= \rho_{nl} \\ E_{nl} &= \frac{\hbar^2 k_{nl}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,\rho_{nl}^2 \end{aligned}$$

Tablo 6.1 de Bessel fonksiyonlarının köklerinden bazıları verilmiştir:

$n\,l$	ρ_{nl}	$n\,l$	ρ_{nl}
$1s$	3.142	$1f$	6.988
$1p$	4.493	$2p$	7.725
$1d$	5.763	$1g$	8.183
$2s$	6.283	$2d$	9.095

Tablo 6.1: Bessel fonksiyonlarının kökleri

Daha önce belirttiğimiz gibi, $l = 0$ olan s-durumları için radyal denklem, tek boyutlu Schrödinger denklemine dönüşür ve sonsuz kuyu çözümleri için dalga sayısı $ka = n\pi$ olur. Yukardaki tabloda s yörüngeleri için π sayısının katları bulunması bu gözlemi doğrulamaktadır.

KÜRESEL KUYU

Yine tek boyutta incelediğimiz kare kuyunun benzeri olarak

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

küresel kuyu tanımlanabilir.

Kuyu içinde (I.bölge) ve dışında radyal Schrödinger denklemi yazılırsa

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[(E+V_0) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]R(r) &= 0 \quad (r \leq a) \\ \frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]R(r) &= 0 \quad (r > a) \end{aligned}$$

Parçacığın enerjisi pozitif ise ($E > 0$) serbest olur. I. bölgede, yeni bir $\alpha^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$ parametresi tanımlarsak, çözüm yine küresel Bessel fonksiyonu olur:

$$u_l^I = A_l\, j_l(\alpha r) \qquad (r \leq a)$$

Kuyu dışında, $r \neq 0$ olduğundan artık Neumann fonksiyonlarının da ıraksak olma endişesi yoktur. O halde, II. bölgede en genel çözüm ($k^2 = 2mE/\hbar^2$)

$$u_l^{II} = B_l\, j_l(kr) + C_l\, n_l(kr)$$

olur. Bu iki bölgedeki dalga fonksiyonlarının ve birinci türevlerinin $r = a$ da sürekli olma koşulları yazılırsa, B_l ve C_l sabitleri A_l cinsinden bulunabilir, yansıma ve geçme katsayıları hesaplanabilir. İşlemler uzun olduğundan buna girmiyoruz.

Parçacığın enerjisi ($-V_0 < E < 0$) ise bağlı durumlar oluşur. Yine kuyu içindeki bölgede pozitif $\alpha^2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2$ parametresi tanımlarsak, çözümler doğrudan yazılabilir:

$$u_l^I = A_l\, j_l(\alpha r) \qquad (r \leq a)$$

Kuyu dışında ise ($E < 0$ olduğundan) $\kappa = -2mE/\hbar^2$ gibi pozitif bir sabit tanımlarsak, II. bölgedeki denklem

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[-\kappa^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r) = 0$$

olur. Bu denklem, serbest parçacık için bulduğumuz Bessel diferansiyel denklemi andırmaktadır, ancak k^2 yerine $-\kappa^2$ gelmiştir. Bessel denkleminde

$$-\kappa^2 = (i\kappa)^2$$

alındığında, yine küresel Bessel ve Neumann fonksiyonlarının sanal değişken $i\kappa r$ cinsinden yazılabileceği ispatlanabilir. O halde, II. bölgede en genel çözüm

$$u_l^{II} = B_l\, j_l(i\kappa r) + C_l\, n_l(i\kappa r) \qquad (r > a)$$

olur. Buradaki B_l ve C_l katsayıları sınır koşullarından elde edilecektir.

Önce, $r = \infty$ de bağlı durum dalga fonksiyonlarının sıfıra gitme koşulunu kullanalım. Bessel ve Neumann fonksiyonlarının asimtotik şekilleri alınırsa

$$\lim_{r\to\infty} j_l(\rho) \approx \frac{1}{\rho}\sin(\rho - l\pi/2)$$

$$\lim_{r\to\infty} n_l(\rho) \approx -\frac{1}{\rho}\cos(\rho - l\pi/2)$$

Burada $\rho = i\kappa r$ alınırsa II. bölgedeki çözümün asimtotik davranışı

$$\lim_{r\to\infty} u_l^{II} = \frac{B_l}{i\kappa r}\sin(i\kappa r - l\pi/2) - \frac{C_l}{i\kappa r}\cos(i\kappa r - l\pi/2)$$

olur. Ancak, buradan itibaren hesaplar uzadığı için, sadece s durumlarıyla ($l = 0$) ilgilenelim.

Kompleks argümanlı trigonometrik fonksiyonlar için

$$\sin iy = -\frac{e^y - e^{-y}}{2i} \qquad \cos iy = \frac{e^y + e^{-y}}{2}$$

özdeşlikleri kullanılırsa ($y = \kappa r$ ve $l = 0$ alalım)

$$\lim_{r\to\infty} u_0^{II} = -\frac{B_0}{i\kappa r}\left(\frac{e^{\kappa r} - e^{-\kappa r}}{2i}\right) - \frac{C_0}{i\kappa r}\left(\frac{e^{\kappa r} + e^{-\kappa r}}{2}\right)$$
$$= \left(\frac{B_0 + iC_0}{2\kappa r}\right) e^{\kappa r} + \left(\frac{-B_0 + iC_0}{2\kappa r}\right) e^{-\kappa r}$$

Bu asimtotik davranışa bakıldığında pozitif üslü terimin ıraksak olacağı görülür. Bunu önlemenin yolu, bu terimin katsayısını sıfır yapmaktır. Buradan

$$C_0 = iB_0$$

bulunur. Bu aşamada, I. ve II. bölgedeki çözümler

$$u_0^I = A_0 \frac{\sin \alpha r}{\alpha r} \qquad (r \le a)$$
$$U_0^{II} = B_0 \left[j_0(i\kappa r) + i n_0(i\kappa r)\right] = -B_0 \frac{e^{-\kappa r}}{\kappa r} \qquad (r > a)$$

olur. Burada, $l = 0$ için, Bessel ve Neumann fonksiyonlarının açık ifadeleri

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho} \qquad n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho}$$

kullanıldı.

Şimdi $r = a$ da dalga fonksiyonu ve onun 1. türevinin sürekli olma koşullarını yazalım:

$$u_0^I(a) = u_0^{II} \quad \Rightarrow \quad A_0 \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} = -B_0 \frac{e^{-\kappa a}}{\kappa a}$$
$$\frac{du_0^I(a)}{dr} = \frac{du_0^{II}(a)}{dr} \quad \Rightarrow \quad \alpha A_0 \frac{\alpha a \cos \alpha a - \sin \alpha a}{(\alpha a)^2} = kB_0 \frac{\kappa a\, e^{-\kappa a} + e^{-\kappa a}}{(\kappa a)^2}$$

yazılır. A_0 ve B_0 iki bilinmeyenli denklem sisteminin çözümü olabilmesi için katsayılar determinantı sıfır olmalıdır. Bu işlem yapılıp sadeleştirilirse

$$\alpha \cot \alpha a = -\kappa$$

bulunur. Bu eşitlik Bölüm 4 de, tek boyutlu kare kuyu probleminde karşılaştığımız, tek pariteli çözümlerin özdeğerlerini veren denklemdir. O halde, 3-boyutlu s durumlarının özdeğerleri, tek boyutlu kare kuyunun tek pariteli çözümlerinin özdeğerleriyle aynıdır. Bu denklemi grafik yolla çözebildiğimizi hatırlatalım. Orada elde ettiğimiz sonuçlardan biri şuydu: Çift pariteli bir bağlı durum her zaman oluşabilir, ancak tek pariteli bir bağlı durum olabilmesi için

$$V_0 a^2 > \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}$$

olması gerekir.

3-BOYUTLU HARMONİK SALINICI

3-boyutlu harmonik salınıcı hamiltonyeni

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2z^2$$

olur (burada her eksen boyunca ω elastik sabiti aynı alındığından, buna *izotropik salınıcı* denir). Bu potansiyel de küresel simetriktir, çünkü

$x^2+y^2+z^2 = r^2$ olur ve potansiyel açılardan bağımsızdır. O halde, radyal denklem

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E - \frac{1}{2}m\omega^2r^2 - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]R(r) = 0$$

olur. Bu denklemin her l için çözümü karmaşıktır. Burada sadece s durumları ($l=0$) için çözümleri arayalım.

Önce, R yerine yeni bir χ fonkiyonu tanımlayalım:

$$R = \frac{\chi}{r}$$

Bu χ fonksiyonu cinsinden radyal denklem s durumları ($l=0$) için yazılırsa

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2r^2\right)\chi = 0$$

olur. Bu denklem, çözümünü bildiğimiz tek boyutlu harmonik salınıcı denklemidir. Ancak, bu kez sınır koşulları farklıdır. Radyal denklemin genel özelliklerini incelerken

$$\lim_{r\to 0}[r\,R(r)] = \lim_{r\to 0}\chi \to 0$$

olması gerektiğini görmüştük. O halde, ancak tek indisli Hermite polinomları $r=0$ da sıfır olacağından, çözümler

$$\begin{aligned}
\chi(r) &= A_{2n+1}\,H_{2n+1}(\alpha r)\,e^{-\alpha^2r^2/2} \qquad (n=0,1,2,3,\ldots)\\
R(r) &= \frac{\chi}{r}\\
E_n &= \left[(2n+1)+\frac{1}{2}\right]\hbar\omega = \left(2n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega
\end{aligned}$$

bulunur (buradaki normlama sabiti A_n ve α daha önce tanımlanmıştı). Görüldüğü gibi, enerji özdeğerleri $3/2\hbar\omega$ sıfır durumu enerjisiyle başlamakta ve iki birim artmaktadır.

6.4 HİDROJEN ATOMU

$-e$ yüklü bir elektronun, $+Ze$ yüklü bir çekirdeğin oluşturduğu $V(r) = -Ze^2/r$ potansiyel alanındaki hareketi atomik yapının en önemli problemidir. Bulunan sonuçlar sadece

hidrojen atomu ($Z = 1$) için değil, iyonlaşmış He^+ ($Z = 2$) veya Li^{++} ($Z = 3$) atomları için de geçerli olur. Ayrıca, elektron yerine, yine negatif yüklü bir elemanter parçacık olan *müon* (μ^-) kullanılırsa, müonik atom denilen yapay sistemlerin de enerji spektrumları elde edilebilir.

Gerçekte hidrojen atomu, (elektron+çekirdek) den oluşan bir *iki-cisim sistemi*dir. Çekirdeğin konumuna $\vec{r}_1$, elektronun konumuna da $\vec{r}_2$ dersek, etkileşme potansiyeli

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{Ze^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

olup, her iki konuma da bağlıdır.

Eğer çekirdeği ağır, yani statik bir cisim olarak kabul edersek, o zaman problem r uzaklıktaki bir elektronun $V(r) = -Ze^2/r$ potansiyelindeki *tek-cisim* hareketine dönüşür.

Çekirdeği statik kabul eden bu yaklaşık çözüme gerek kalmadan da genel problemi çözebiliriz. Klasik mekanikten bilinen *iki cisim probleminin indirgenmesi* tekniği, kuantum mekaniğinde de Schrödinger denklemi için geçerlidir. O halde, önce bu problemi ele alalım.

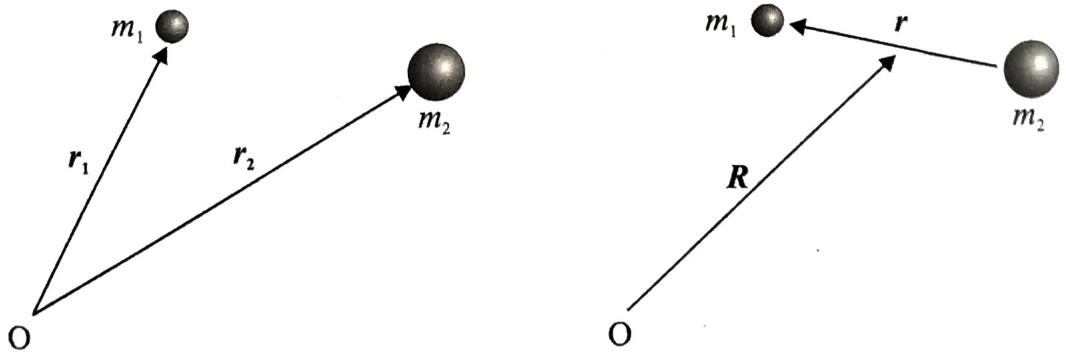
6.4.1 İKİ PARÇACIK SİSTEMİNİN İNDİRGENMESİ

Klasik mekanikten bilindiği gibi, iki-cisim sistemi, biri *kütle merkezinin hareketi*, diğeri de *bağıl hareket* olmak üzere iki bağımsız sisteme indirgenebilir. Kütle merkezi serbest parçacık hareketi yaparken, bağıl sistem $V(r)$ potansiyelinde hareket eder. Şimdi, bu özelliği kuantal olarak görelim.

Kütleleri m_1 ve m_2 olan iki parçacığın konum ve momentumlarını, sırasıyla $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ ve $\vec{p}_1, \vec{p}_2$ ile gösterelim (Şekil 6.5). Bu sistemin hamiltonyeni

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \tag{6.23}$$

olur. Burada V potansiyeli, küresel simetriden dolayı, sadece parçacıklar arasındaki uzaklığın bir fonksiyonudur.



Şekil 6.5: İki-cisim sisteminde koordinatlar.

Momentum operatörleri $\vec{p}_1 = -i\hbar\vec{\nabla}_1$ ve $\vec{p}_2 = -i\hbar\vec{\nabla}_2$ kullanarak Schrödinger denklemi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)\right]\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = E\,\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \qquad (6.24)$$

olarak yazılabilir. Burada $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ dalga fonksiyonu 6 tane koordinata bağlı olduğu için, problemi bu haliyle çözmek hayli zordur.

Oysa, potansiyel fonksiyonunun, $(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ konumlarına ayrı ayrı değil de, sadece aralarındaki $(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ uzaklığına bağlı oluşu problemi basite indirgeme olanağı verir.

İşlemlerin uzunluğu nedeniyle, bu işlemi tek boyutlu uzayda gösterelim. İki parçacık sisteminin Schrödinger denklemi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(|x_1 - x_2|)\right]\Psi(x_1,x_2) = E\,\Psi(x_1,x_2)$$

(x_1,x_2) koordinatları yerine iki yeni koordinat tanımlayalım:

$$X = \frac{m_1x_1 + m_2x_2}{M} \qquad \text{(Kütle merkezi koordinatı)}$$
$$x = x_1 - x_2 \qquad \text{(Bağıl koordinat)}$$

Burada $M = m_1 + m_2$ toplam kütle olur. Bu tanımları kullanarak kismi türevleri X ve x koordinatları cinsinden ifade edelim:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial X}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}$$
$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial X}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_2}{M}\frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x}$$
$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \frac{m_1^2}{M^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{2m_1}{M}\frac{\partial^2}{\partial X\partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$
$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{m_2^2}{M^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{2m_2}{M}\frac{\partial^2}{\partial X\partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Bu ifadeler Schrödinger denkleminde yerine konulduğunda, karışık türevli terimler sadeleşir:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\Psi(X,x) = E\,\Psi(X,x)$$

Burada m kütlesi

$$m = \frac{m_1m_2}{m_1 + m_2}$$

indirgenmiş kütle adını alır. Bu denklemin

$$\Psi(X,x) = \phi(X)\,\psi(x)$$

şeklinde çarpanlarına ayrılmış bir çözümünü arayalım. Kısmi türevler alınıp her iki taraf $\phi\psi$ ile bölünür ve x değişkenine bağlı terimler bir tarafta toplanırsa

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\phi''}{\phi} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''}{\psi} - V(x) + E$$

yazılabilir. Yine, iki taraf da farklı değişkenlere bağlı oldukları için, aynı bir sabite eşit olmaları gerekir. Bu sabite E' dersek,sonuçta iki adi diferansiyel denklem elde edilir:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2\phi}{dX^2} &= E'\phi(X) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V(x)\,\psi(x) &= (E-E')\,\psi(x) \end{aligned} \tag{6.25}$$

1. Denklem kütle merkezi koordinatı X e bağlı bir serbest parçacık Schrödinger denklemidir. Çözümü doğrudan yazılırsa

$$\phi(X) = Ae^{iKX} \qquad (K^2 = 2ME'/\hbar^2) \tag{6.26}$$

gibi bir düzlem dalga olup enerjisi $E' = \hbar^2K^2/2M$ dir.

Diğer denklem, bağıl x koordinatına bağlı $V(x)$ potansiyelinde, $(E - E')$ enerjisiyle hareket eden, indirgenmiş m kütleli bir parçacığın Schrödinger denklemidir. Bunun çözümü olan $\psi(x)$ bulunduktan sonra, komple dalga fonksiyonu

$$\Psi(x_1, x_2) = Ae^{iKX}\psi(x) \tag{6.27}$$

olur. Elektron (m_e) ve protondan (m_p) oluşan bir sistemde $(m_e \ll m_p)$ olacağı için, yaklaşık olarak

$$\begin{aligned} X &= \frac{m_e x_e + m_p x_p}{m_e + m_p} \simeq x_p \\ m &= \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \simeq m_e \end{aligned}$$

bulunur. Başka bir deyişle, (i) Kütle merkezi koordinatı protonun (veya, çekirdeğin) koordinatıyla çakışır ve (ii) Bağıl hareketi yapan cisim elektron olur.

6.4.2 HİDROJEN ATOMU RADYAL DALGA FONKSİYONLARI

İndirgenmiş m kütleli bir parçacığın 3-boyutlu uzayda $V(r) = -Ze^2/r$ potansiyelindeki hareketi için radyal Schrödinger denklemi,

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right] R(r) = 0 \tag{6.28}$$

olur. $V(r)$ potansiyeli çekici olduğu için $(V \leq 0)$, bağlı durumların varlığı ancak $(E < 0)$ olduğunda mümkündür. Burada sadece bağlı durumları inceleyeğiz.

Radyal denklemi boyutsuz hale getirmek amacıyla, boyutsuz bir ρ değişkeni ve λ enerji parametresi tanımlayalım:

$$\begin{aligned} \rho &= \alpha r \qquad (\alpha^2 = -8mE/\hbar^2 \text{ ve } E < 0) \\ \lambda &= \frac{Ze^2}{\hbar}\sqrt{-\frac{m}{2E}} \end{aligned}$$

Bu değişiklikten sonra boyutsuz radyal denklem

$$\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right)+\left[\lambda\rho-\frac{1}{4}\rho^2-l(l+1)\right]R=0 \tag{6.29}$$

olur. Bu denklemi kuvvet serisi yöntemiyle çözmeden önce, asimtotik davranışına bakalım.

Radyal fonksiyonun genel özelliklerini incelerken (Kısım 6.3), küçük ρ değerleri için

$$\lim_{r\to 0} R(r)\simeq r^l$$

şeklinde davranacağını görmüştük.

Büyük ρ değerleri için ($\rho\to\infty$), denklemdeki $\rho^2/4$ terimi diğerlerini bastıracağı için, yaklaşık olarak

$$\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right)-\frac{1}{4}\rho^2\,R\simeq 0$$

alınabilir. Bunun genel çözümü

$$R(\rho)=Ae^{-\rho/2}+Be^{+\rho/2}$$

olur. Çözümün sonsuzda ıraksak olmaması için $B=0$ gerekir.

Bu iki asimtotik davranışı gördükten sonra, $R(\rho)$ dalga fonksiyonu için

$$R(\rho)=\rho^l\,e^{-\rho/2}\,L(\rho) \tag{6.30}$$

şeklinde bir çözüm arayalım. Bu iki davranışı açığa almaktan amaç, kalan $L(\rho)$ fonksiyonu için polinom şeklinde bir çözüm yakalamaktır.

Bu ifade radyal denklemde kullanılırsa, L nin sağladığı yeni denklem

$$\rho\frac{d^2L}{d\rho^2}+(2l+2-\rho)\frac{dL}{d\rho}+(\lambda-l-1)\,L=0 \tag{6.31}$$

olur. Bu denklemi kuvvet serisi yöntemiyle çözmek üzere

$$L(\rho)=c_0+c_1\rho+c_2\rho^2+\cdots=\sum_{i=0}^{\infty}c_i\rho^i$$

gibi bir seri alınır ve gerekli türevler hesaplanır:

$$\begin{aligned}
\frac{dL}{d\rho} &= c_1+2c_2\rho+3c_3\rho^2+\cdots=\sum_i(i+1)c_{i+1}\rho^i\\
\rho\frac{dL}{d\rho} &= c_1\rho+2c_2\rho^2+3c_3\rho^3+\cdots=\sum_i ic_i\rho^i\\
\frac{d^2L}{d\rho^2} &= 1.2c_2+2.3c_3\rho+3.4c_4\rho^2+\cdots=\sum_i(i+1)(i+2)c_{i+2}\rho^i\\
\rho\frac{d^2L}{d\rho^2} &= 1.2c_2\rho+2.3c_3\rho^2+3.4c_4\rho^3+\cdots=\sum_i i(i+1)c_{i+1}\rho^i
\end{aligned}$$

Bu ifadeleri diferansiyel denklemde kullanıp, aynı kuvvetli ρ^i katsayıları biraraya toplarsak

$$\sum_i [i(i+1)c_{i+1} + (2l+2)(i+1)c_{i+1} - ic_i + (\lambda - l - 1)c_i]\rho^i = 0$$

olur. Bu eşitliği her ρ değerinde sağlayabilmek için köşeli parantez içindeki ifadenin sıfır olması gerekir. Buradan c_i katsayıları için tekrarlama bağıntısı elde edilir:

$$c_{i+1} = \frac{i+l+1-\lambda}{(i+1)(i+2l+2)}\, c_i \tag{6.32}$$

İlk c_0 katsayısı bilinirse, diğer katsayılar bu bağıntı yardımıyla türetilebilirler.

Bu seri çözümü yakınsak mıdır? Cevap için oran testi uygulayalım:

$$\lim_{i\to\infty} \frac{c_{i+1}}{c_i} \to \frac{i}{i.i} = \frac{1}{i}$$

Bu davranış, e^ρ fonksiyonunun seri açılımındaki katsayıların davranışı gibidir. Nitekim

$$e^\rho = 1 + \rho + \frac{1}{2!}\rho^2 + \frac{1}{3!}\rho^3 + \cdots = \sum_i \frac{1}{i!}\rho^i$$

serisine aynı test uygulanırsa

$$\lim_{i\to\infty} \frac{c_{i+1}}{c_i} = \frac{i!}{(i+1)!} = \frac{1}{i+1} \simeq \frac{1}{i}$$

aynı limit bulunur.

O halde, $L(\rho)$ için bulunan sonsuz terimli seri çözümü ($\rho \to \infty$) için e^ρ gibi ıraksak olmaktadır. Buna bağlı olarak $R(\rho)$ dalga fonksiyonu da

$$R(\rho) = \rho^l e^{-\rho/2} L(\rho) \simeq \rho^l e^{-\rho/2}\, e^\rho \simeq \rho^l\, e^{+\rho/2}$$

ıraksak olacaktır ve dalga fonksiyonu olarak kabul edilemez.

Bu sorunu aşmanın yolu, seri çözümünün sonlu sayıda bitmesidir. Bunun için, tekrarlama bağıntısında belli bir i_{max} indisinden sonra payın sıfır olması gerekir:

$$i_{max} + l + 1 = \lambda$$

Eşitliğin sol tarafındaki indisler tamsayı olduğundan, sağ taraftaki enerji parametresi λ da tamsayı olacaktır. Bu tamsayı değeri n ile gösterilir ve *temel kuantum sayısı* adını alır.

$$n = i_{max} + l + 1 \tag{6.33}$$

ifadesinde ($i_{max} = 0, 1, 2, \ldots$) gibi her değeri alabileceği için $l = n - 1 - i_{max}$ yörünge kuantum sayısı da ancak ($l = n-1, n-2, \ldots, 2, 1, 0$) değerlerini alabilir veya

$$l \le n - 1$$

olur.

$\lambda = n$ parametresini enerjiye bağlayan ifade kullanılırsa

$$n = \frac{Ze^2}{\hbar}\sqrt{-\frac{m}{2E}}$$

hidrojen atomu enerji düzeyleri elde edilmiş olur:

$$\boxed{E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \qquad (n = 1,2,3,\ldots)} \tag{6.34}$$

Rydberg sabiti $R = me^4/2\hbar^2 = 13.6$ eV cinsinden yazılırsa

$$E_n = -R\frac{Z^2}{n^2}$$

$\lambda = n$ alındığında $L(\rho)$ polinomlarının sağladığı diferansiyel denklem

$$\rho\frac{d^2L}{d\rho^2} + [2(l+1) - \rho]\frac{dL}{d\rho} + [n - (l+1)]\,L = 0 \tag{6.35}$$

olur. Bu denklemin çözümleri matematikte *bağlı Laguerre polinomları* cinsinden ifade edilebilir. Laguerre diferansiyel denklemi

$$\rho\frac{d^2L_q^p}{d\rho^2} + (p+1-\rho)\frac{dL_q^p}{d\rho} + (q-p)\,L_q^p = 0 \tag{6.36}$$

olarak tanımlanır. Burada p ve q iki tamsayıdır.

Bu iki diferansiyel denklemi karşılaştırdığımızda

$$\begin{aligned} p &= 2l+1 \\ q &= n+l \end{aligned}$$

olması gerektiği ortaya çıkar. O halde, aradığımız radyal dalga fonksiyonu

$$R_{nl}(\rho) = N_{nl}\,\rho^l\,e^{-\rho/2}\,L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \tag{6.37}$$

Laguerre Polinomlarının Özellikleri

Laguerre polinomlarının literatürde kullanımı değişiktir. Burada Pauling ve Wilson ile Schiff'in kullandığı notasyonu takip ediyoruz. Messiah, Merzbacher ve Liboff'un notasyonu bundan farklıdır.

Laguerre diferansiyel denkleminde $p = 0$ olduğunda çözümler *Laguerre polinomları* adını alır ve L_q ile gösterilir. Laguerre polinomlarını türetmek için

$$L_q(\rho) = e^{\rho}\frac{d^q}{d\rho^q}\left(\rho^q e^{-\rho}\right) \tag{6.38}$$

bağıntısı kullanılabilir. Buradan yola çıkarak bağlı Laguerre polinomları

$$L_q^p(\rho) = \frac{d^p}{d\rho^p}L_q(\rho) \tag{6.39}$$

bağıntısıyla türetilebilir. İlk birkaç Laguerre polinomunu yazarsak

$$L_1(\rho) = L_1^0 = 1-\rho \qquad L_2(\rho) = 2-4\rho+\rho^2 \qquad L_3(\rho) = 6-18\rho+9\rho^2-\rho^3 \tag{6.40}$$

Görüldüğü gibi, L_q polinomunun mertebesi q olur. Bağlı Laguerre polinomlarından birkaçı şöyle yazılabilir:

$$L_2^1(\rho) = -4+2\rho \qquad L_2^2(\rho) = 2$$
$$L_3^1(\rho) = -18+18\rho-3\rho^2 \qquad L_3^2(\rho) = 18-6\rho \qquad L_3^3(\rho) = -6$$

Genel olarak,

$$L_q^q(\rho) = (-1)^q\, q! \tag{6.41}$$

olur.

Diklik Bağıntısı:

$$\int_0^\infty d\rho\, \rho^{p+1}\, \mathrm{e}^{-\rho}\, L_q^p\, L_{q'}^p = \frac{(2q-p+1)\,(q!)^3}{(q-p)!}\,\delta_{qq'} \tag{6.42}$$

Tekrarlama Bağıntıları:

$$L_q^p(\rho) = q[L_{q-1}^p - L_{q-1}^{p-1}]$$
$$\rho\, L_q^p(\rho) = (q+1-p)\, L_q^{p-1}(\rho) - q^2 L_{q-1}^{p-1}(\rho) \tag{6.43}$$

Türev Bağıntısı:

$$\frac{d}{d\rho}L_q^p(\rho) = L_q^{p+1} \tag{6.44}$$

Radyal dalga fonksiyonlarının Laguerre polinomlarıyla ilişkisini inceledikten sonra artık çözümleri yazabiliriz. Önce, *Bohr yarıçapı* adında bir sabit

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.5292\text{Å} \tag{6.45}$$

tanımlayalım. Bu ifadede indirgenmiş m kütlesinin kullanıldığına dikkat edelim: bu sabit, daha önce Bölüm 1 de tanımlanmıştı.

Yukardaki diklik bağıntısından da normlanma sabiti N_{nl} hesaplanırsa, sonuç olarak

$$\boxed{R_{nl}(r) = \left(\frac{2Z}{na}\right)^{3/2}\left[\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right]^{1/2}\rho^l\,\mathrm{e}^{-\rho/2}\,L_{n+l}^{2l+1}(\rho)} \tag{6.46}$$

olur. Burada ρ değişkeni

$$\rho = \alpha r = \frac{2Zr}{na}$$

olarak tanımlanır.

İlk birkaç R_{nl} radyal dalga fonksiyonunu şöyle sıralayabiliriz:

$$1s\text{ durumu}: \quad R_{10}(r) = 2\left[\frac{Z}{a}\right]^{3/2}\mathrm{e}^{-Zr/a}$$

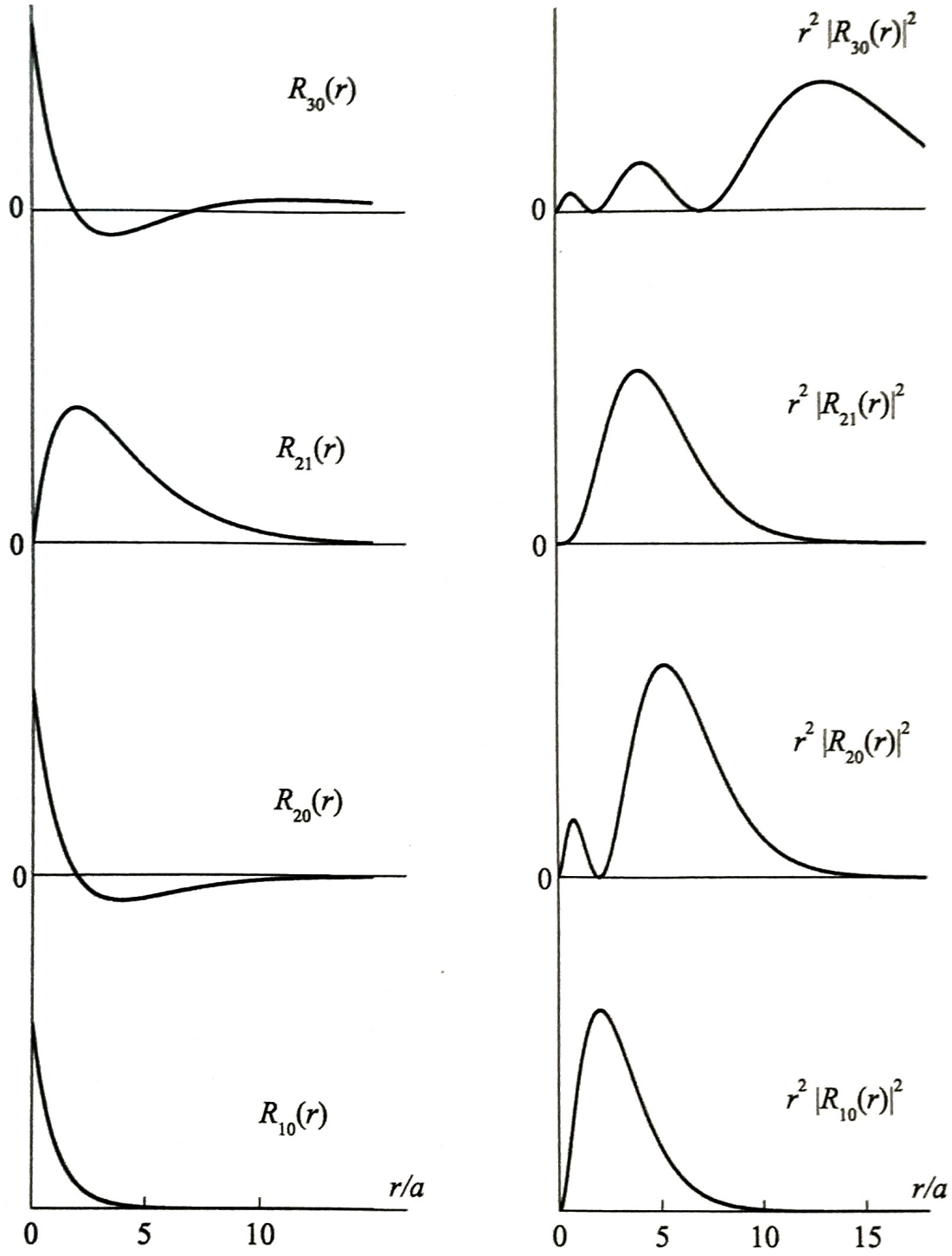
$$2s\text{ durumu}: \quad R_{20}(r) = 2\left[\frac{Z}{2a}\right]^{3/2}\left(1-\frac{Zr}{2a}\right)\mathrm{e}^{-Zr/2a}$$

$$2p\text{ durumu}: \quad R_{21}(r) = \sqrt{\frac{1}{3}}\left[\frac{Z}{2a}\right]^{3/2}\frac{Zr}{a}\,\mathrm{e}^{-Zr/2a}$$

$$3s\text{ durumu}: \quad R_{30}(r) = 2\left[\frac{Z}{3a}\right]^{3/2}\left(1-\frac{2Zr}{3a}+\frac{2Z^2r^2}{27a^2}\right)\mathrm{e}^{-Zr/3a}$$

$$3p \text{ durumu}: \quad R_{31}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{3}\left[\frac{Z}{3a}\right]^{3/2}\frac{Zr}{a}\left(1-\frac{Zr}{6a}\right)e^{-Zr/3a}$$

$$3d \text{ durumu}: \quad R_{32}(r) = \frac{2}{27}\sqrt{\frac{2}{5}}\left[\frac{Z}{3a}\right]^{3/2}\left(\frac{Zr}{a}\right)^{2}e^{-Zr/3a} \qquad (6.47)$$



Şekil 6.6: Radyal dalga fonksiyonları R_{nl} ve r uzaklığında bulunma olasılık yoğunluğu $r^2|R_{nl}|^2$.

Şekil 6.6 da R_{nl} dalga fonksiyonları ve fiziksel açıdan daha anlamlı olan $(r^2|R_{nl}|^2)$ olasılık yoğunlukları verilmiştir.

Açısal dalga fonksiyonları olan küresel harmonikleri de kullandığımızda komple dalga fonksiyonu

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}\, Y_l^m(\theta,\phi) \tag{6.48}$$

olur.

Buraya kadar elde ettiğimiz sonuçların bir irdelemesini yapalım:

- Elektronun her özdurumu $\{n,l,m\}$ gibi üç kuantum sayısı ile belirlenir:

  Temel kuantum sayısı : $n = 1,2,3,\ldots$

  Yörünge kuantum sayısı : $l = 0,1,2,3,\ldots,n-1$

  Magnetik kuantum sayısı : $m = -l,-l+1,\ldots,-1,0,1,\ldots,l-1,l$

- Enerji özdeğerleri sadece n kuantum sayısına bağlı olur:

$$E_n = -\frac{Z^2 R}{n^2} \qquad (R = 13.6\ \text{eV})$$

  Bu sonuca göre, her n enerjili durum, (l,m) kuantum sayılarının alabileceği değerler kadar katlı olacaktır. Örneğin, $n = 0$ için sadece $l = 0$ ve $m = 0$ olabileceği için, taban durumu katlı değildir. Ancak, $n = 2$ için $(l = 0, m = 0)$ ve $(l = 1, m = -1,0,1)$ olabileceğinden katlılık derecesi 4 olur.

  Her n kuantum sayısı için n tane l sayısı ve her l için de $2l+1$ tane m sayısı olabiliyorsa, bunların toplamı

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$$

  olur. O halde, n kuantum sayılı bir enerji düzeyinin katlılık derecesi n^2 dir. Daha sonra görüleceği gibi, elektronun spin açısal momentumu da, iki farklı değer alabilir. Buna göre, gerçek katlılık derecesi, bulduğumuz değerin iki katı, yani $2n^2$ olur.

- Gerçekte, enerji düzeylerinin sadece n kuantum sayısına bağlı olduğu doğru değildir. Aynı n sayısına ait enerji düzeylerinin küçük farklılıklar gösterdiği daha ilk yıllarda deneysel olarak gözlenmişti (buna *ince yapı* denir). 1916 yılında Arnold Sommerfeld relativite teorisine dayanarak bu ince yapıyı kısmen açıklayabilmişti. Ancak, Sommerfeld'in açıklaması alkali metal atomlarında geçerli olmuyordu.

  1925 yılında, Goudsmit ve Uhlenbeck elektronun spin açısal momentumu hipotezini ortaya attıktan sonra, bu ince yapı doğru olarak açıklanabilmiştir. Enerji düzeylerinin diğer l kuantum sayısına bağlılığını daha sonra inceleyeceğiz.

- Herhangi bir (n,l) yörüngesinde, elektronun çekirdekten uzaklığının r ile $r+dr$ arasında bulunma olasılık yoğunluğu $r^2|R_{nl}|^2$ ile verilir. Bu olasılığın maksimum olduğu uzaklığa o yörüngenin yarıçapı gözüyle bakılabilir. Şekil 6.6 dan görüldüğü gibi, n kuantum sayısı büyüdükçe, elektron yörüngesinin yarıçapı

da büyümektedir. Özel olarak, $1s$ taban durumunun yarıçapını bulmak için, bu olasılığın maksimum olduğu yer hesaplanırsa

$$\begin{aligned}\frac{d}{dr}|R_{10}(r)|^2 r^2 &= 0\\ \frac{d}{dr}\left[r^2\, e^{-2Zr/a}\right] &= (2r - 2Zr^2/a)e^{-2Zr/a} = 0\\ r &= a/Z\end{aligned}$$

bulunur. O halde, a/Z değeri, Ze yüklü bir çekirdekte en küçük elektron yörüngesinin yarıçapı olur. Buna *1. Bohr yarıçapı* denir.

- Radyal dalga fonksiyonları kullanarak konumun beklenen değeri hesaplanırsa

$$\begin{aligned}\langle r\rangle_{nl} &= \int_0^\infty dr\, r^2\, r|R_{nl}|^2 = \int_0^\infty dr\, r^3\, R_{nl}^2\\ &= \frac{a}{2Z}[3n^2 - l(l+1)]\\ &= \frac{n^2 a}{Z}\left\{1 + \frac{1}{2}\left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2}\right]\right\}\end{aligned}$$

bulunur (Laguerre polinomlarının özelliklerini ayrıntılı incelemediğimiz için bu sonucu ispatsız veriyoruz). Köşeli parantez içindeki ifadenin birden küçük olduğu gözönüne alınırsa, $\langle r\rangle$ değerinin n^2 ye bağlı olarak hızla arttığı görülür. Verilen bir n düzeyinde ise, en büyük $\langle r\rangle$ değeri ($l = 0$) s durumları, yani dairesel yörüngeler için olur. l arttıkça (eliptik yörüngelerde) $\langle r\rangle$ değeri küçülür.

Çok kullanışlı bazı beklenen değerler için sonuçları verelim:

$$\begin{aligned}\langle r^2\rangle_{nl} &= \frac{n^2a^2}{2Z^2}[5n^2 + 1 - 3l(l+1)]\\ \left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{nl} &= \frac{Z}{n^2 a}\end{aligned}$$

Alıştırma 6.3 : (a) He^+ iyonu ve (b) müonlu hidrojen atomu için 1. Bohr yarıçapı ve taban durumu enerjisinin nasıl değiştiğini inceleyin.

Çözüm : Temel büyüklükleri sıralayalım:

$$\begin{aligned}&\text{İndirgenmiş kütle} && m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\\ &\text{1. Bohr yarıçapı :} && a_1 = \frac{a}{Z} \qquad (a = \frac{\hbar^2}{me^2})\\ &\text{Taban durumu enerjisi :} && E_1 = -RZ^2 = -\frac{Z^2 e^2}{2a^2}\end{aligned}$$

(Son formülde Rydberg sabiti $R = me^4/2\hbar^2$ tanımında a oluşturuldu.)

(a) Helyum iyonunda çekirdekte 2 proton ve 2 nötron olduğundan

$$Z=2 \qquad \text{ve} \qquad m=\frac{m_e}{1+m_e/(2M_n+2M_p)} \simeq m_e$$

olur (paydadaki kütlelerin oranı $\approx 10^{-4}$ olduğundan ihmal edilebilir). O halde a sabiti hidrojenle aynı olacaktır.

Buna göre, hidrojen atomuna kıyaslarsak: Birinci Bohr yarıçapı yarıya iner, taban durumu enerjisi 4 kat artar.

(b) Müonlu hidrojen atomunda elektron yerine, kütlesi elektronun 200 katı kadar olan μ^- parçacığı kullanılmıştır ($m_\mu = 207m_e$). Buna göre, çekirdekteki protonun kütlesi de $m_p = 1835m_e$ alınırsa

$$\begin{aligned} Z &= 1 \\ m &= \frac{m_\mu m_p}{m_\mu + m_p} = \frac{207\times 1835}{207+1835} m_e \simeq 186 m_e \end{aligned}$$

bulunur. O halde, a sabiti, dolayısıyla 1. Bohr yarıçapı 186 kat daha küçük, buna karşılık taban durumu enerjisi $186 \times 186 = 35000$ kat daha fazla olacaktır.

Alıştırma 6.4 : Hidrojen atomunda 2s durumunda radyal uzaklığın maksimum olasılığı veren değerini hesaplayın.

Çözüm : Yukarda verilen R_{20} fonksiyonu kullanılarak olasılık yoğunluğu hesaplanırsa

$$\begin{aligned} R_{20} &= \text{sabit} \times \mathrm{e}^{-r/2a}\,(1-r/2a) \\ P(r) &= r^2|R_{20}|^2 = \text{sabit} \times r^2\,\mathrm{e}^{-r/a}\,(1-r/2a)^2 \end{aligned}$$

bulunur. Bu olasılığın ekstremum değeri türevin sıfır olduğu yerdedir:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr}P(r) &= 0 \\ \frac{d}{dr}\left[r^2\,\mathrm{e}^{-r/a}\,(1-r/2a)^2\right] &= 0 \\ x(2-x)(x^2-6x+4)\mathrm{e}^{-x} &= 0 \qquad (x=r/a) \end{aligned}$$

Bu denklemin sıfırdan farklı üç kökü $r=2a$, $r=(3\pm\sqrt{5})a$ olur. İkinci türeve bakıldığında, $r=2a$ değerinin minimum, diğerlerinin maksimum olduğu görülür. (Şekil 6.6 daki $2s$ dağılımına bakın.)

Alıştırma 6.5 : $l=n-1$ olan her n düzeyinde radyal olasılık yoğunluğunun $r=n^2a$ için maksimum olduğunu gösterin.

Çözüm : $R_{n,n-1}$ radyal dalga fonksiyonunu Laguerre polinomları cinsinden yazarsak

$$\begin{aligned} R_{n,n-1}(r) &= \text{sabit} \times \left(\frac{2r}{na}\right)^{n-1} \mathrm{e}^{-r/na}\, L_{n+n-1}^{2(n-1)+1}(\rho) \\ &= \left(\frac{2r}{na}\right)^{n-1} \mathrm{e}^{-r/na}\, L_{2n-1}^{2n-1}(\rho) \end{aligned}$$

olur. Yukarda Laguerre polinomları için verilen

$$L_q^q(\rho) = (-1)^q\, q!$$

bağıntısı kullanılırsa

$$R_{n,n-1}(r) = \text{sabit} \times \left(\frac{2r}{na}\right)^{n-1} \mathrm{e}^{-r/na}\,(-1)^{2n-1}\,(2n-1)!$$

$x = r/na$ kullanılır ve x e bağlı olmayan çarpanlar sabit içine katılırsa, olasılık yoğunluğu ifadesi

$$P(r) = r^2|R_{n,n-1}|^2 = \text{sabit} \times x^{2n}\mathrm{e}^{-2x}$$

olur. Bu ifadenin x e göre türevi

$$\frac{dP}{dx} = [2n\,x^{2n-1} - 2x^{2n}]\mathrm{e}^{-2x} = 2x^{2n}(n-x)\,\mathrm{e}^{-2x} = 0$$

$$x = n \qquad \text{veya} \qquad r = n^2a \qquad \text{bulunur.}$$

Alıştırma 6.6 : Bir hidrojen atomunun dalga fonksiyonu

$$\Psi(r,\theta\phi) = Ar\,\mathrm{e}^{-r/2a}[\sin\theta\,\cos\phi + 2\cos\theta]$$

olarak veriliyor. (a) Dalga fonksiyonunu ψ_{nlm} özfonksiyonlarının süperpozisyonu olarak yazın, (b) Normlayın, (c) Açısal momentumun z bileşeni ölçüldüğünde $-\hbar$ bulunma olasılığı nedir? (d) Enerjinin, açısal momentumun karesinin ve z-bileşeninin beklenen değerlerini bulun.

Çözüm : (a) Radyal dalga fonksiyonları ve küresel harmonikler için verdiğimiz tabloların ışığında bu dalga fonksiyonu incelenirse:

Üstel fonksiyondaki $(-r/2a)$ faktöründen dolayı bu dalga fonksiyonu $n = 2$ olan özdurumların bir süperpozisyonu olacaktır. Ayrıca

$$\cos\phi = \frac{\mathrm{e}^{i\phi} + \mathrm{e}^{-i\phi}}{2}$$

olduğundan parantez içindeki birinci ifade $l = 1$ ve $m = \pm 1$ durumlarını belirler. Son terimde ise sadece $\cos\theta$ olduğundan bu $l = 1, m = 0$ olan durumun katkısıdır. Küresel harmoniklerin katsayılarına bakıldığında, sonuç olarak

$$\Psi(r,\theta,\phi) = A\{\psi_{211} + \psi_{21-1} + 2\psi_{210}\}$$

yazılabilir.

(b) Hidrojen atom özdurumlarının ortonormal olduğu gözönüne alınırsa integral hesaplamaya gerek kalmadan bu dalga fonksiyonu normlanır:

$$1 = ||\Psi||^2 = A^2\{||\psi_{211}||^2 + ||\psi_{21-1}||^2 + 4||\psi_{210}||^2\} = 6A^2$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{6}}$$

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{6}}\psi_{211} + \frac{1}{\sqrt{6}}\psi_{21-1} + \frac{2}{\sqrt{6}}\psi_{210}$$

bulunur.

(c) L_z operatörünün özdeğerleri $m\hbar$ olduğundan, $m = -1$ bulma olasılığı, bu özdurumun katsayısının karesiyle verilir:

$$P(m=-1) = \frac{1}{6}$$

(d) Enerjinin beklenen değeri, her üç durumda da $n = 2$ olduğundan, kesin olarak bellidir:

$$\langle E \rangle = E_2 = -\frac{13.6}{2^2} = -3.4 \text{ eV}$$

Açısal momentumun karesi olan L^2 nin özdeğeri her üç durumda da $l = 1$ olduğundan, kesin bellidir:

$$\langle L^2 \rangle = l(l+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$$

L_z bileşeni her üç durumda farklı olup ($m = 0, \pm 1$) olabilir. Herbir m değerini, o özdurumun olasılığıyla çarpıp toplam alırsak

$$\langle L_z \rangle = \frac{1}{6} \times (1) + \frac{1}{6} \times (-1) + \frac{4}{6} \times (0) = 0 \quad \text{olur.}$$

PROBLEMLER

6.1 *(a) Döteron (ağır hidrojen), (b) Li^{++} iyonu ve (c) pozitronyum (bir pozitron ve elektrondan oluşan sistem) için, 1. Bohr yarıçapı ve taban durumu enerjisinin hidrojene oranla nasıl değiştiğini inceleyin.*

6.2 *(a) Bir $\hat{A}$ operatörü açısal momentumun L_x ve L_y bileşenleriyle sıra değiştiriyorsa, L^2 ile de sıra değiştireceğini gösterin. (b) Bu kez $\hat{A}$ operatörü L_x^2 ve L_y^2 ile sıra değiştiriyor. L^2 ile sıra değiştirir mi?*

6.3 *Küresel simetrik bir potansiyelde L^2 ve L_z nin özdurumlarının L_x^2 ve L_y^2 nin özdurumları olmadığını, ancak $L_x^2 + L_y^2$ nin özdurumları olacağını gösterin.*

6.4 *Alçak sıcaklıklarda diatomik moleküller, sadece dönme enerji düzeyleri uyarıldığı için, birer rijit dönücü olarak kabul edilebilirler. 20 K sıcaklığında bir H_2 molekülünün dalga fonksiyonu*

$$\psi(\theta, \phi) = A\left[Y_1^1 + 2Y_3^2 + 5Y_4^1\right]$$

olarak biliniyor. (a) Bu dalga fonksiyonunu normlayın, (b) Ölçme sonucu hangi L^2 ve L_z değerlerinin ve hangi olasılıklarla bulunabileceğini hesaplayın, (c) Açısal momentumun karesi ve z-bileşeninin beklenen değerlerini bulun, (d) Hidrojen molekülünün eylemsizlik momentini $I/\hbar^2 \simeq 10^4 \text{eV}^{-1}$ alarak enerjinin beklenen değerini bulun.

6.5 *$[a, 2a]$ aralığındaki bir sonsuz küresel kuyudaki elektronun taban durumu enerjisini bulun (bu kez $r = 0$ konumu kuyu sınırı dışında olduğu için, dalga fonksiyonu hem $j_0(kr)$ ve hem de $n_0(kr)$ fonksiyonunun süperpozisyonu olacaktır).*

6.6 *$3p$ durumunda bulunan bir hidrojen atomunda radyal uzaklığın maksimum olasılığı veren değerlerini hesaplayın.*

6.7 *Hidrojen atomunun* $(n = 4, l = 2)$ *durumundaki bir elektronun açısal momentum vektörünün z-ekseniyle yaptığı açı ne olur?*

6.8 *(a) Kutupsal koordinatlarda açısal momentumun x-bileşeninin*

$$L_x = i\hbar\left(\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\,\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

olduğunu gösterin, (b) $(l = 1, m = 1)$ *olan bir durumda* L_x^2 *operatörünün beklenen değerini bulun (Hermitik operatör için* $(\psi, A^2\psi) = (A\psi, A\psi)$ *olduğunu kullanın.)*

6.9 *Hidrojen atomunun* $(n = 2, l = 1)$ *durumundaki bir elektronun a ve 2a arasında bulunma olasılığını hesaplayın.*

6.10 *Bir protonun yarıçapı* $\simeq 10^{-11}$ *cm veya Bohr yarıçapı cinsinden* $\simeq 10^{-5}a$ *kadardır. Hidrojen atomunda bir elektronun protonun içindeki bir bölgede bulunma olasılığını 2s ve 2p durumları için hesaplayın. Sonuçları yorumlayın (l arttıkça klasik eliptik yörünge daha da basıklaşır).*

6.11 *Bir elektronun* $(n = 2, l = 1)$ *ve* $(n = 2, l = 0)$ *durumlarında çekirdeğe 1. Bohr yarıçapından daha yakında bulunma olasılıklarını hesaplayın ve karşılaştırın.*

6.12 *Radyal uzaklığın beklenen değerini* $(n = 3, l = 2)$ *durumu için doğrudan hesaplayın ve metinde verilen* $\langle r\rangle_{nl}$ *ifadesiyle karşılaştırın.*

6.13 Viriyel teoremi. *Metinde verilen* $\langle 1/r\rangle_{nl}$ *ifadesini kullanarak, bir* (n, l) *özdurumunda potansiyel ve kinetik enerjilerin beklenen değerini hesaplayın ve*

$$\langle V\rangle_{nl} = -\langle K\rangle_{nl} = \frac{1}{2}E_n$$

olduğunu gösterin.

6.14 *Bir hidrojen atomunun komple dalga fonksiyonu*

$$\Psi(r, \theta, \phi) = A\, r^2\, e^{-r/3a}\,\left[\sin^2\theta\,\cos 2\phi + 3\sin\theta\,\cos\theta\,\sin\phi\right]$$

olarak veriliyor. (a) Metinde verilen radyal ve açısal dalga fonksiyonu tablolarıyla karşılaştırıp, bu dalga fonksiyonunu ψ_{nlm} *özdurumlarının süperpozisyonu olarak yazın, (b) Normlayın, (c) Açısal momentumun z-bileşeni ölçüldüğünde* $-2\hbar$ *bulma olasılığını hesaplayın, (d) Enerji,* L^2 *ve* L_z *nin beklenen değerlerini bulun.*

BÖLÜM 7

YAKLAŞIK YÖNTEMLER ve PERTÜRBASYON TEORİSİ

Schrödinger denkleminin tam olarak çözülebildiği önemli fiziksel problemlerin sayısı sınırlıdır. Bu yüzden yaklaşık çözümler kuantum mekaniği uygulamalarında büyük önem taşırlar. *Pertürbasyon teorisi* denilen bir yaklaşımda, çözümler bir seri olarak verilir. Katlı durumlar olup olmadığına göre bu seri çözümleri farklı olur. Diğer bir yaklaşım olan *varyasyon yöntemi*nde özenerjileri minimize ederek bulmak mümkündür. Öte yandan, radyasyon problemlerinde uyarılmış durumlardan geçiş olasılıkları hesaplanırken *zamana bağımlı pertürbasyon yöntemi* kullanmak zorunlu olur.

7.1 PERTÜRBASYON AÇILIMI

Bir sistemin hamiltonyeni H için Schrödinger denkleminin

$$H\psi_n = E_n\psi_n \tag{7.1}$$

analitik olarak çözülüp ψ_n özdurumları ve E_n özdeğerleri bulunamadığını varsayalım. Eğer bu hamiltonyen, çözümü bilinen bir H_0 hamiltonyeni ile bir V *pertürbasyon* teriminin toplamı olarak yazılabiliyorsa

$$H = H_0 + V$$

o takdirde, yaklaşık bir çözüm bulunabilir.

Atom ve çekirdek fiziğinde karşılaşılan birçok problemde hamiltonyen böyle iki kısma gayet doğal bir şekilde ayrılır. Örneğin, hidrojen atomunda elektron spini $\vec{S}$ ile yörünge açısal momentumu $\vec{L}$ iki magnetik dipol gibi etkileşirler ve sistemin enerjisine katkıları $\vec{L}.\vec{S}$ skaler çarpımına oranlı bir terim oluşturur. Toplam hamiltonyen

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}}_{H_0} + \underbrace{f(r)\,\vec{L}.\vec{S}}_{V}$$

olarak yazılırsa, V terimi gerçekten de H_0 hidrojen atomu hamiltonyenine ufak bir katkı oluşturur.

Diğer bir örnekte, diatomik moleküllerin titreşim hamiltonyeni saf bir harmonik salınıcı olmayıp küçük bir anharmonik katkı içerir:

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2}_{H_0} + \underbrace{K' x^4}_{V}$$

Yine bu anharmonik V terimine küçük bir pertürbasyon gözüyle bakılabilir.

H_0 hamiltonyeninin özdeğer problemi için,

$$H_0 u_n = \varepsilon_n u_n \tag{7.2}$$

u_n özfonksiyonları ve ε_n özdeğerleri biliniyor olsun. Gerçek problemin hamiltonyenini

$$H = H_0 + \lambda V \tag{7.3}$$

şeklinde bir λ reel parametresine bağlı olarak yazalım (bu λ parametresi seri açılımını kolaylaştırmak içindir, işlemler sonunda $\lambda = 1$ alınacaktır).

H hamiltonyeninin özdeğer ve özfonksiyonlarını bu λ parametresine bağlı bir seri olarak arayalım:

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i E_n^{(i)} \\ \psi_n &= \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \cdots = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i \psi_n^{(i)} \end{aligned} \tag{7.4}$$

Burada $E_n^{(i)}$ ve $\psi_n^{(i)}$ gerçek enerji ve dalga fonksiyonuna i mertebesinden olan katkıları göstermektedir. Bu katkılar için bir ifade bulursak, istediğimiz i mertebesine kadar olan terimleri ekleyerek gerçek problemi çözebiliriz.

Bu ifadeler Denklem 7.1 de kullanılırsa

$$(H_0 + \lambda V)(\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \cdots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \cdots)(\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \cdots)$$

yazılabilir. Bu eşitlikteki terimleri λ parametresinin kuvvetlerine göre yazarsak

$$\begin{aligned} &\left[H_0 \psi_n^{(0)} - E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}\right] + \lambda \left[H_0 \psi_n^{(1)} + V \psi_n^{(0)} - E_n^{(0)} \psi_n^{(1)} - E_n^{(1)} \psi_n^{(0)}\right] \\ &+\lambda^2 \left[H_0 \psi_n^{(2)} + V \psi_n^{(1)} - E_n^{(0)} \psi_n^{(2)} - E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} \psi_n^{(1)} - E_n^{(2)} \psi_n^{(0)}\right] + \cdots = 0 \end{aligned}$$

olur. Bu eşitliğin λ parametresinin her değeri için doğru olabilmesi için herbir λ kuvvetinin katsayısı sıfır olmalıdır. Böylece her bir dereceden pertürbasyon çözümleri için ifadeler elde edilir:

$$\begin{aligned} \left[H_0 - E_n^{(0)}\right] \psi_n^{(0)} &= 0 \\ \left[H_0 - E_n^{(0)}\right] \psi_n^{(1)} &= \left[E_n^{(1)} - V\right] \psi_n^{(0)} \\ \left[H_0 - E_n^{(0)}\right] \psi_n^{(2)} &= \left[E_n^{(1)} - V\right] \psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \psi_n^{(0)} \end{aligned}$$

Bu denklemler, sırasıyla, 0, 1, 2, ... mertebesinden yaklaşık çözümleri verirler.

Örneğin, 0. mertebeden çözüme bakalım. Bu, çözümünü bildiğimiz H_0 hamiltonyeninin özdeğer denklemidir:

$$H_0\ \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$$

O halde,

$$\begin{aligned} E_n^{(0)} &= \varepsilon_n \\ \psi_n^{(0)} &= u_n \end{aligned} \tag{7.5}$$

olur. Daha yüksek mertebeden bulacağımız terimler buna eklenecektir.

7.1.1 1. DERECEDEN PERTÜRBASYON ÇÖZÜMLERİ

Birinci dereceden pertürbasyon denklemini ele alalım. 0. derece çözümleri kullanılırsa

$$\begin{aligned} \left[H_0 - E_n^{(0)}\right]\ \psi_n^{(1)} &= \left[E_n^{(1)} - V\right]\ \psi_n^{(0)} \\ \left[H_0 - \varepsilon_n\right]\ \psi_n^{(1)} &= \left[E_n^{(1)} - V\right]\ u_n \end{aligned}$$

yazılabilir. H_0 hamiltonyeninin özfonksiyonları $\{u_j\}$ ortonormal bir baz oluşturdukları için her dalga fonksiyonu bu bazda bir seri açılımı olarak yazılabilir. Özel olarak, ψ_n dalga fonksiyonuna 1.dereceden katkı olan $\psi_n^{(1)}$ fonksiyonu bu bazda yazılırsa

$$\psi_n^{(1)} = \sum_j c_{jn}^{(1)} u_j$$

bulunacak $c_{jn}^{(1)}$ katsayıları problemin çözümünü verirler. Buna göre, 1.derece denklemi

$$\begin{aligned} \left[H_0 - \varepsilon_n\right] \sum_j c_{jn}^{(1)} u_j &= \left[E_n^{(1)} - V\right] u_n \\ \sum_j \left[\varepsilon_j - \varepsilon_n\right]\ c_{jn}^{(1)} u_j &= \left[E_n^{(1)} - V\right] u_n \end{aligned}$$

olur. (Burada $H_0\ u_j = \varepsilon_j\ u_j$ olduğunu hatırlayalım). Bu denklemin bir u_i baz vektörüyle skaler çarpımı alınırsa

$$\begin{aligned} \sum_j \left[\varepsilon_j - \varepsilon_n\right]\ c_{jn}^{(1)} (u_i, u_j) &= E_n^{(1)} (u_i, u_n) - (u_i, V\ u_n) \\ \sum_j \left[\varepsilon_j - \varepsilon_n\right]\ c_{jn}^{(1)} \delta_{ij} &= E_n^{(1)} \delta_{in} - (u_i, V\ u_n) \\ \left[\varepsilon_i - \varepsilon_n\right]\ c_{in}^{(1)} &= E_n^{(1)} \delta_{in} - (u_i, V\ u_n) \end{aligned}$$

olur (Ortonormal bazda $(u_i, u_j) = \delta_{ij}$ olduğu kullanıldı).

Bu denklemden hem enerji hem de dalga fonksiyonuna 1. dereceden katkıları bulabiliriz.

$i = n$ seçilirse, eşitliğin sol tarafı sıfır olacağından

$$E_n^{(1)} = (u_n, Vu_n) \tag{7.6}$$

bulunur. Bu sonuca göre, enerji özdeğerine 1. dereceden katkı, pertürbasyon terimi V nin, H_0 hamiltonyeninin u_n özdurumundaki beklenen değeri olur. O halde, gerçek enerji özdeğerinin 1. dereceden yaklaşık değeri

$$E_n = \varepsilon_n + (u_n, Vu_n)$$

Aynı denklemde, $i \neq n$ alınırsa dalga fonksiyonuna 1. dereceden katkıyı buluruz. Bu durumda, $(u_i, u_n) = 0$ olacağından

$$\begin{aligned} [\varepsilon_i - \varepsilon_n]\, c_{in}^{(1)} &= 0 - (u_i, V\, u_n) \\ c_{in}^{(1)} &= \frac{(u_i, V\, u_n)}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} \qquad (i \neq n) \end{aligned}$$

bulunur. Bu katsayılar cinsinden dalga fonksiyonuna katkı

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{i \neq n} c_{in}^{(1)}\, u_i = \sum_{i \neq n} \frac{V_{in}}{\varepsilon_n - \varepsilon_i}\, u_i$$

olur. Burada, $V_{in} = (u_i, Vu_n)$ matris elemanıdır.

Sonuç olarak, dalga fonksiyonu ve enerji özdeğerlerine 1. dereceden yaklaşık çözümler şöyle yazılabilir:

$$\boxed{\begin{aligned} E_n &= \varepsilon_n + V_{nn} \\ \psi_n &= u_n + \sum_{i \neq n} \frac{V_{in}}{\varepsilon_n - \varepsilon_i}\, u_i \end{aligned}} \tag{7.7}$$

Bu sonuncu denklem bize pertürbasyon yaklaşımının hangi koşullarda geçerli olduğuna dair bir fikir vermektedir: Her sonsuz seri açılımında, katsayıların birden küçük olması gerektiğinden

$$\left| \frac{V_{in}}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} \right| \ll 1 \qquad \longrightarrow \qquad |V_{in}| \ll |\varepsilon_n - \varepsilon_i|$$

Daha açık bir deyişle, pertürbasyon teriminin bir V_{ij} matris elemanı, ε_n özdeğerleri arasındaki farktan küçük olmalıdır. Enerji için bulunan denkleme göre de,

$$|V_{nn}| \ll |\varepsilon_n|$$

yani, V nin beklenen değeri (veya köşegen matris elemanları) $E_n^{(0)}$ enerji düzeyine kıyasla küçük olmalıdır.

Yukardaki c_{ni} katsayıları çözümünde paydadaki $(\varepsilon_n - \varepsilon_i)$ terimine dikkat edelim. Eğer, H_0 hamiltonyenli sistemin katlı durumları varsa, herhangi iki i ve n indisi için $\varepsilon_i = \varepsilon_n$ olabilir ve payda sıfır olacağı için seri açılımı geçersiz olur. O halde, buraya kadar verdiğimiz çözümler ancak katlı olmayan durumlar için geçerlidir. Örneğin, tek boyutlu problemlerde bir katlılık sözkonusu olmadığından kullanabiliriz.

Katlı durumların pertürbasyon teorisini daha sonraya bırakarak devam edelim.

7.1.2 2. DERECEDEN PERTÜRBASYON ÇÖZÜMLERİ

Bazı durumlarda, pertürbasyon terimi V nin $\{u_n\}$ durumları arasında hesaplanan matris elemanları sıfır olabilirler. Bu durumda, enerji ve dalga fonksiyonuna 1. dereceden katkı oluşmaz ve 2. derece katkılarına bakmak gerekir.

Yukarda verilen 2. derece pertürbasyon denklemini tekrar ele alalım:

$$\left[H_o - E_n^{(0)}\right]\ \psi_n^{(2)} = \left[E_n^{(1)} - V\right]\ \psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\ \psi_n^{(0)}$$

Bu denklemde, 0. ve 1. derece çözümleri kullanılırsa

$$(H_o - \varepsilon_n)\ \psi_n^{(2)} \ = \ [V_{nn} - V] \sum_{i\neq n} c_{in}^{(1)} u_i + E_n^{(2)}\ u_n$$

yazılabilir. Yine, $\{u_k\}$ bazında, $\psi_n^{(2)}$ fonksiyonunu seri açılımı olarak yazıp $c_k^{(2)}$ katsayılarını arayalım:

$$\psi_n^{(2)} = \sum_k c_{kn}^{(2)}\ u_k$$

Bu çözümü kullandığımızda,

$$\begin{aligned}
[H_o - \varepsilon_n] \sum_k c_{kn}^{(2)}\ u_k \ &= \ [V_{nn} - V] \sum_{i\neq n} c_{in}^{(1)} u_i + E_n^{(2)}\ u_n \\
\sum_k [\varepsilon_k - \varepsilon_n] c_{kn}^{(2)}\ u_k \ &= \ [V_{nn} - V] \sum_{i\neq n} c_{in}^{(1)} u_i + E_n^{(2)}\ u_n
\end{aligned}$$

olur. Bu denklemin de, bir u_j baz vektörüyle skaler çarpımı alınıp, ortonormallik özelliği kullanılırsa

$$\begin{aligned}
\sum_k [\varepsilon_k - \varepsilon_n] c_{kn}^{(2)} (u_j, u_k) \ &= \ V_{nn} \sum_{i\neq n} c_{in}^{(1)} (u_j, u_i) - \sum_{i\neq n} c_{in}^{(1)} (u_j, Vu_i) + E_n^{(2)}\ (u_j, u_n) \\
\sum_k [\varepsilon_k - \varepsilon_n] c_{kn}^{(2)}\ \delta_{jk} \ &= \ V_{nn} \sum_{i\neq n} c_{in}^{(1)} \delta_{ji} - \sum_{i\neq n} c_{in}^{(1)} V_{ji} + E_n^{(2)}\ \delta_{jn} \\
[\varepsilon_j - \varepsilon_n] c_{jn}^{(2)} \ &= \ V_{nn} \sum_{i\neq n} c_{in}^{(1)} \delta_{ji} - \sum_{i\neq n} c_{in}^{(1)} V_{ji} + E_n^{(2)}\ \delta_{jn}
\end{aligned}$$

Bu denklem sistemi, $c_k^{(2)}$ katsayılarını ve dolayısıyla, enerji ve dalga fonksiyonuna 2. dereceden katkıları verecektir.

Yine, $j = n$ alıp enerji katkılarını arayalım. Eşitliğin sol tarafı sıfır olacağı ve i indisli 1. toplamın katkısı olmayacağından,

$$E_n^{(2)} \ = \ \sum_{i\neq n} c_{in}^{(1)} V_{ni}$$

bulunur. Bir önceki kısımda bulduğumuz $c_{in}^{(1)}$ katsayılarını da kullanırsak

$$E_n^{(2)} = \sum_{i\neq n} \frac{|V_{ni}|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} \qquad (7.8)$$

bulunur (Burada V operatörü hermitik olduğundan $V_{in}V_{ni} = V_{ni}^*V_{ni} = |V_{ni}|^2$ özelliğini kullandık).

$j \neq n$ aldığımızda $c_j^{(2)}$ katsayılarını buluruz. İşlemler sonucunda

$$c_{jn}^{(2)} = \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_j}\left(\sum_{i\neq n}\frac{V_{ji}V_{in}}{\varepsilon_n - \varepsilon_i}\right) - \frac{V_{nn}V_{jn}}{(\varepsilon_n - \varepsilon_j)^2} \tag{7.9}$$

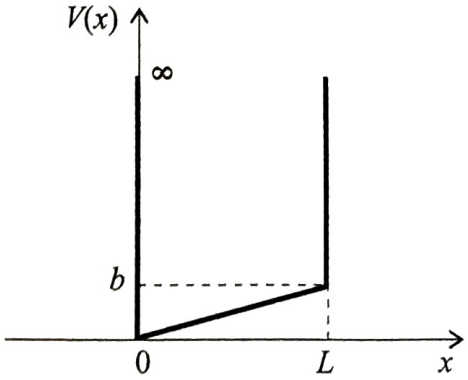
bulunur.

Bu sonuçlara, 1. dereceden terimleri de eklersek, sonuç olarak, E_n enerjisine ve ψ_n dalga fonksiyonuna 2. dereceden yaklaşık çözümleri yazabiliriz:

$$\boxed{\begin{aligned} E_n &= \varepsilon_n + V_{nn} + \sum_{i\neq n}\frac{|V_{ni}|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} \\ \psi_n &= u_n + \sum_{j\neq n}\left[\frac{V_{jn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_j} - \frac{V_{nn}V_{jn}}{(\varepsilon_n - \varepsilon_j)^2} + \sum_{i\neq n}\frac{V_{ji}V_{in}}{(\varepsilon_n - \varepsilon_j)(\varepsilon_n - \varepsilon_i)}\right]u_j \end{aligned}} \tag{7.10}$$

Yukarı derece çözümlere gidildikçe ifadelerin daha karmaşık hale geldiği açıkça görülmektedir.

Alıştırma 7.1 : $[0,L]$ aralığındaki sonsuz kuyu potansiyelinin tabanında ufak bir eğim $V(x) = (b/L)x$ olarak veriliyor ($b \ll L$). Enerji özdeğerlerindeki değişmeyi bulun.



Şekil 7.1: Sonsuz kuyu potansiyeli tabanındaki $V(x)$ değişimi.

Çözüm : Sonsuz kuyu potansiyelini V_0 ile gösterirsek $H_0 = p^2/2m + V_0$ hamiltonyeninin çözümleri Bölüm 4 de bulunmuştu:

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= \frac{\hbar^2 n^2}{2mL^2} \\ u_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L} \end{aligned}$$

$V(x)$ pertürbasyon teriminin enerji özdeğerlerine 1. dereceden katkısı

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= (u_n, V\,u_n) = \int_0^L dx\, u_n^*(x)V(x)\,u_n(x) = \frac{b}{L}\int_0^L dx\, x\,|u_n(x)|^2 \\ &= \frac{b}{L}\frac{2}{L}\int_0^L dx\, x\,\sin^2\frac{n\pi x}{L} = 2b\int_0^1 du\, u\,\sin^2 n\pi u \end{aligned}$$

olur. Bu integralin değeri $1/4$ dir. Sonuç olarak, yeni enerji özdeğerlerinin 1. dereceden yaklaşık çözümü

$$E_n = \varepsilon_n + V_{nn} = \frac{\hbar^2 n^2}{2mL^2} + \frac{b}{2}$$

olur. Tüm enerji düzeyleri $b/2$ (ortalama değer) kadar kayma gösterirler.

Alıştırma 7.2: **Anharmonik salınıcı.** *Aşağıdaki hamiltonyenin enerji özdeğerlerine 1. dereceden yaklaşık çözümleri bulun.*

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + Kx^4$$

Çözüm: $V = Kx^4$ terimini pertürbasyon olarak kabul edelim. $H_0 = p^2/2m + 1/2m^2x^2$ harmonik salınıcı hamiltonyeninin çözümlerini Bölüm 4 de bulmuştuk:

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= (n+1/2)\,\hbar\omega \\ u_n(r) &= \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}} H_n(\alpha x)\, \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2} \qquad (\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}) \end{aligned}$$

Burada $H_n(\rho)$ Hermite polinomlarıdır. Buna göre, 1. dereceden yaklaşık enerjiler

$$\begin{aligned} E_n &= \varepsilon_n + E_n^{(1)} \\ &= (n+1/2)\,\hbar\omega + V_{nn} = (n+1/2)\,\hbar\omega + (u_n, Vu_n) \end{aligned}$$

olur. Bu skaler çarpımı hesaplayalım:

$$\begin{aligned} (u_n, V\,u_n) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n^*(x)\, V(x)\, u_n(x) = K\int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^4\, |u_n(x)|^2 \\ &= K\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^4\, \mathrm{e}^{-\alpha^2x^2} H_n^2(\rho) \qquad (\rho = \alpha x) \\ &= \frac{K}{\alpha^5}\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\int_{-\infty}^{\infty} d\rho\, \mathrm{e}^{-\rho^2}\, \rho^4\, H_n^2(\rho) \end{aligned}$$

Hermite polinomlarının diklik ve tekrarlama bağıntılarını hatırlatalım:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho\, \mathrm{e}^{-\rho^2}\, H_n(\rho)H_m(\rho) &= \sqrt{\pi}2^n n!\, \delta_{nm} \\ H_{n+1} &= 2\rho H_n - 2nH_{n-1} \end{aligned}$$

Yukardaki integraldeki $\rho^4\, H_n^2$ terimini, tekrarlama bağıntısı kullanarak indirgeyebiliriz. Tekrarlama bağıntısı yeniden yazılırsa

$$\begin{aligned} \rho H_n &= nH_{n-1} + \frac{1}{2}H_{n+1} \\ \rho^2 H_n &= n\rho H_{n-1} + \frac{1}{2}\rho H_{n+1} \\ &= n[(n-1)H_{n-2} + \frac{1}{2}H_n] + \frac{1}{2}[(n+1)H_n + \frac{1}{2}H_{n+2}] \\ &= n(n-1)H_{n-2} + \frac{2n+1}{2}H_n + \frac{1}{4}H_{n+2} \end{aligned}$$

Bu ifadenin karesi alındığında H_nH_m çarpımları oluşacaktır. Diklik bağıntısına göre, farklı indisli Hermite polinomlarının integrali sıfır olacağı için, sadece aynı indisli terimlerin çarpımlarını yazalım:

$$\rho^4 H_n^2 = [\rho^2 H_n]^2 = n^2(n-1)^2 H_{n-2}^2 + \frac{(2n+1)^2}{4} H_n^2 + \frac{1}{16} H_{n+2}^2 + \cdots$$

Bu ifadeyi integralde yerine koyup herbir terim için diklik bağıntısı kullanılırsa

$$\begin{aligned}
(u_n, V\, u_n) &= \frac{K}{\alpha^5} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \int_{-\infty}^{\infty} d\rho\, e^{-\rho^2}\, \rho^4\, H_n^2(\rho) \\
&= \frac{K}{\alpha^4 2^n n!} \left[n^2(n-1)^2\, 2^{n-2}(n-2)! + \frac{(2n+1)^2}{4}\, 2^n\, n! + \frac{1}{16}\, 2^{n+2}\, (n+2)! \right] \\
&= \frac{K}{4\alpha^4} [n(n-1) + (2n+1)^2 + (n+1)(n+2)] \\
E_n^{(1)} &= \frac{3K}{4\alpha^4} [2n^2 + 2n + 1]
\end{aligned}$$

bulunur. Sonuç olarak, anharmonik salınıcı özdeğeri yazılır:

$$\begin{aligned}
E_n &= \varepsilon_n + (u_n, V u_n) \\
&= \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{3K}{4\alpha^4} [2n^2 + 2n + 1]
\end{aligned}$$

Alıştırma 7.3 : Elektrik yükü $-e$ olan bir harmonik salınıcı, şiddeti $\mathscr{E}$ olan bir elektrik alana konulduğunda, hamiltonyende $V(x) = e\mathscr{E}\, x$ gibi bir etkileşme terimi oluşmaktadır. Harmonik salınıcı enerji özdeğerlerindeki değişmeyi 2. dereceye kadar hesaplayın.

Çözüm : Yine $V = e\mathscr{E}\, x$ terimi pertürbasyon olarak alınırsa, 1. dereceden yaklaşık terim

$$E_n^{(1)} = (u_n, V\, u_n) = e\mathscr{E} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\, |u_n(x)|^2$$

olur. Harmonik salınıcı özfonksiyonlarının tek veya çift pariteye sahip olduklarını Bölüm 4 de görmüştük. Buna göre, integralin içi tek fonksiyon olduğundan sonuç sıfır olur. O halde, pertürbasyonun 1. dereceden katkısı oluşmaz ve 2. dereceye gitmek gerekir:

$$E_n^{(2)} = \sum_{i \neq n} \frac{|V_{ni}|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_i}$$

V_{ni} matris elemanını ayrı hesaplayalım:

$$\begin{aligned}
V_{ni} &= (u_n, V\, u_i) = e\mathscr{E} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_n^*(x)\, x\, u_i(x) \\
&= e\mathscr{E} \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right]^{1/2} \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^i i!} \right]^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\rho^2}\, H_n(\rho)\, x\, H_i(\rho) \\
&= \frac{e\mathscr{E}}{\sqrt{\pi}\alpha} \left[\frac{1}{2^n n!\, 2^i\, i!} \right]^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\rho\, e^{-\rho^2}\, H_n(\rho)\, \rho\, H_i(\rho) \qquad (\rho = \alpha x)
\end{aligned}$$

Bir önceki alıştırmada olduğu gibi ρH_n çarpımını tekrarlama bağıntısı kullanarak indirgeyelim:

$$\rho H_n = nH_{n-1} + \frac{1}{2}H_{n+1}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\rho\, \mathrm{e}^{-\rho^2} H_n(\rho)\, \rho\, H_i(\rho) = n\int_{-\infty}^{\infty} d\rho\, \mathrm{e}^{-\rho^2} H_{n-1}H_i + \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} d\rho\, \mathrm{e}^{-\rho^2} H_{n+1}H_i$$

Diklik bağıntısına göre, bu integrallerin sıfırdan farklı olabilmesi için, sırasıyla $i = n-1$ ve $i = n+1$ olmak zorundadır. Bu i değerleri yerine konursa

$$V_{ni} = \frac{e\mathscr{E}}{\sqrt{\pi}\alpha}\left[\frac{1}{2^n n!\, 2^i\, i!}\right]^{1/2} \sqrt{\pi} 2^i\, i!\, \left[n\,\delta_{i,n-1} + \tfrac{1}{2}\,\delta_{i,n+1}\right]$$

$$= \frac{e\mathscr{E}}{\alpha}\left[\frac{2^i\, i!}{2^n n!}\right]^{1/2} \left[n\,\delta_{i,n-1} + \tfrac{1}{2}\,\delta_{i,n+1}\right]$$

$$V_{n,n-1} = \frac{e\mathscr{E}}{\alpha}\sqrt{\frac{n}{2}}$$

$$V_{n,n+1} = \frac{e\mathscr{E}}{\alpha}\sqrt{\frac{n+1}{2}}$$

bulunur. Şimdi, $E_n^{(2)}$ ifadesindeki i indisli toplama geçersek, sadece $i = n-1$ ve $i = n+1$ olan terimler katkıda bulunacaktır. $\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ olduğu da gözönüne alınırsa

$$E_n^{(2)} = \sum_{i\neq n} \frac{|V_{ni}|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_i} = \frac{|V_{n,n-1}|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}} + \frac{|V_{n,n+1}|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n+1}}$$

$$= \frac{\mathrm{e}^2\mathscr{E}^2}{\alpha^2}\left[\frac{(n/2)}{\hbar\omega} + \frac{(n+1)/2}{(-\hbar\omega)}\right] = -\frac{\mathrm{e}^2\mathscr{E}^2}{\alpha^2}\frac{1}{2\hbar\omega} = -\frac{\mathrm{e}^2\mathscr{E}^2}{2m\omega^2} \qquad (\alpha^2 = m\omega/\hbar)$$

olur. Sonuç olarak, $-e$ yüklü bir salınıcının bir elektrik alandaki yaklaşık enerji özdeğerleri yazılabilir:

$$E_n = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{\mathrm{e}^2\mathscr{E}^2}{2m\omega^2}$$

7.1.3 KATLI DURUMLARIN PERTÜRBASYON TEORİSİ

Buraya kadarki incelemede u_n durumunun katlı olmadığı varsayıldı. H_0 hamiltonyenin özdurumlarında katlılık varsa yukarda verdiğimiz seri açılımı geçersiz olacaktır. Örneğin, 1.dereceden dalga fonksiyonu ifadesinde i indisli toplamda bazı i değerleri için paydadaki $\varepsilon_n - \varepsilon_i$ terimi sıfır olur ve seri ıraksaklaşır.

Konuyu açığa kavuşturmak için önce en basit durum olan iki kez katlı bir durumu ele alalım. H_0 hamiltonyeninin aynı ε_n özdeğerine sahip u_n ve u_l gibi iki özdurumu olsun:

$$H_0\, u_n = \varepsilon_n\, u_n$$

$$H_0\, u_l = \varepsilon_n\, u_l$$

1. dereceden pertürbasyon denklemini hatırlayalım:

$$\left[H_0 - E_n^{(0)}\right]\ \psi_n^{(1)} = \left[E_n^{(1)} - V\right]\ \psi_n^{(0)}$$

Gerçekte, bu denklemdeki 0. dereceden çözüm olan $\psi_n^{(0)}$ fonksiyonunun u_n mi yoksa u_m mi olacağı belirtilmemiştir. En genel çözüm, yukardaki iki katlı durumun bir süperpozisyonu olabilir:

$$\psi_n^{(0)} = a_n u_n + a_l u_l$$

Bu ifadeyi eşitliğin sağ tarafında kullanalım

$$[H_0 - \varepsilon_n]\ \psi_n^{(1)} = \left[E_n^{(1)} - V\right]\ (a_n u_n + a_l u_l)$$

ve hem u_n ve hem de u_l ile skaler çarpımlarını alalım (yazılımda kolaylık olması amacıyla $E_n^{(1)} = W_n$ yazıyoruz):

$$\begin{aligned}
(u_n, [H_0 - \varepsilon_n]\ \psi_n^{(1)}) &= (u_n, [W_n - V]\ [a_n u_n + a_l u_l]) \\
0 &= W_n a_n - (u_n, V\ u_n) a_n - (u_n, V\ u_l) a_l \\
(u_l, [H_0 - \varepsilon_n]\ \psi_n^{(1)}) &= (u_l, [W_n - V]\ [a_n u_n + a_l u_l]) \\
0 &= W_n a_l - (u_l, V\ u_n) a_n - (u_l, V\ u_l) a_l
\end{aligned}$$

bulunur (H_0 hermitik olduğundan sol tarafındaki u özvektörüne etki ettirdik ve $\{u_i\}$ kümesinin ortonormallik özelliğini kullandık). W_n değerini bulabilmek için, bu iki denklemi şöyle yazalım:

$$\begin{aligned}
[V_{nn} - W_n] a_n + V_{nl} a_l &= 0 \\
V_{ln} a_n + [V_{ll} - W_n] a_l &= 0
\end{aligned}$$

Bu, a_n ve a_l iki bilinmeyeni için homojen bir denklem sistemidir. Çözümü olabilmesi için katsayılar determinantı sıfır olmalıdır:

$$\det \begin{vmatrix} V_{nn} - W_n & V_{nl} \\ V_{ln} & V_{ll} - W_n \end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{aligned}
[V_{nn} - W_n][V_{ll} - W_n] - V_{nl} V_{ln} &= 0 \\
W_n^2 - [V_{nn} + V_{ll}] W_n + [V_{nn} V_{ll} - |V_{nl}|^2] &= 0
\end{aligned}$$

Buradan, iki çözüm elde edilir:

$$\begin{aligned}
W_{n_1} &= \frac{1}{2}\left\{(V_{nn} + V_{ll}) + \sqrt{(V_{nn} - V_{ll})^2 + 4|V_{nl}|^2}\right\} \\
W_{n_2} &= \frac{1}{2}\left\{(V_{nn} + V_{ll}) - \sqrt{(V_{nn} - V_{ll})^2 + 4|V_{nl}|^2}\right\}
\end{aligned}$$

(Bu iki kökün eşit olabilmesinin ancak $V_{nl} = 0$ ve $V_{nn} = V_{ll}$ için mümkün olabileceğine dikkati çekelim. Bu durumda, 2. derece pertürbasyon denklemini kullanmak gerekirdi.)

Dikkat edilirse, yaptığımız iş, V_{ij} matrisini köşegenleştiren W_n özdeğerlerini bulmaktır. Bu değerler denklem sisteminde yerine konduğunda a_n ve a_l katsayıları, dolayısıyla özfonksiyonlar elde edilebilir.

Sonuç olarak, katlı olan E_n durumu, enerjileri $E_{n_1} = \varepsilon_n + W_{n_1}$ ve $E_{n_2} = \varepsilon_n + W_{n_2}$ olan farklı iki duruma ayrışır, yani *pertürbasyon sonucu katlılık ortadan kalkar.* Pertürbasyon teorisinin en önemli sonucu budur.

Bu yöntemi genelleştirelim: H_0 hamiltonyeninin bir E_n özdeğerine m tane $u_{n_1}, u_{n_2}, \ldots, u_{n_m}$ özdurumları karşılık gelsin (yani, m kere katlı bir durum olsun). Bu durumlar, $\{u_l\}$ bazında m boyutlu bir alt uzay oluştururlar. Pertürbasyon terimi V nin bu alt uzaydaki tüm matris elemanları V_{ij}, $(i,j) = n_1, n_2, \ldots, n_m$ hesaplanır ve $\{V_{ij}\}$ matrisi oluşturulur. Daha sonra, bu $m \times m$ matrisin özdeğer problemi olan

$$\det \begin{vmatrix} V_{n_1,n_1} - W_n & V_{n_1,n_2} & \cdots & V_{n_1,n_m} \\ V_{n_2,n_1} & V_{n_2,n_2} - W_n & \cdots & V_{n_2,n_m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{n_m,n_1} & V_{n_m,n_2} & \cdots & V_{n_m,n_m} - W_n \end{vmatrix} = 0$$

denklemi çözülerek $W_{n_1}, W_{n_2}, \ldots, W_{n_m}$ değerleri bulunur. Eğer, tüm bu W_n değerleri birbirinden farklıysa, katlılık tamamen ortadan kalkmış demektir. Ancak, yine bazı özdeğerler aynı kalıyorsa, katlılık kısmen kaldırılmış olur.

Alıştırma 7.4 : (a) İki boyutlu izotropik harmonik salınıcı hamiltonyeni

$$H_0(x,y) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2$$

nin özdeğer ve özfonksiyonlarını bulun. Herbir durumun katlılık derecesini inceleyin.

(b) Bir pertürbasyon terimi $V(x,y) = Kxy$ olarak veriliyor. 1. uyarılmış durumun yeni enerjilerini hesaplayın.

Çözüm : Bu problem tek boyutlu salınıcı problemi yardımıyla kolayca çözülüp özdeğer ve özfonksiyonlar bulunabilir. Ancak, tek boyutlu problemden farkı, enerji düzeylerinin katlı oluşudur.

Bir hamiltonyen

$$H_0 = H_0(x) + H_0(y)$$

gibi iki terimin toplamı olarak yazılabiliyorsa, bunun özfonksiyonları $\psi(x,y) = X(x)Y(y)$ gibi faktörize edilebilir. Burada $X(x)$ sadece $H_0(x)$ hamiltonyeninin özfonksiyonudur. Bu, kolayca ispat edilebilecek genel bir özelliktir.

O halde, iki boyutlu salınıcı probleminin çözümlerini doğrudan yazabiliriz:

$$\begin{aligned} \psi_n &= \psi_{n_1}(x)\, \psi_{n_2}(y) \\ \varepsilon_n &= \varepsilon_{n_1} + \varepsilon_{n_2} = \left(n_1 + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_2 + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega = (n+1)\hbar\omega \\ \psi_{n_1}(x) &= N_{n_1} H_{n_1}(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2} \\ \psi_{n_2}(y) &= N_{n_2} H_{n_2}(\alpha y) e^{-\alpha^2 y^2/2} \end{aligned}$$

$$n = n_1 + n_2 \qquad \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar} \qquad N_m = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^m m!}}$$

Enerji özdeğerleri $n = n_1 + n_2$ gibi tek bir kuantum sayısı ile belirlenirler. $n = 0$ olabilmesi ancak $n_1 = n_2 = 0$ için mümkün olabileceğinden, taban durumu katlı değildir. Ancak, diğer n değerlerinde değişik (n_1, n_2) kombinasyonları aynı n değerini verebileceğinden tüm uyarılmış durumlar katlı olurlar. Örneğin

$n = 1$ için:

$(n_1 = 0, n_2 = 1)$ veya $(n_1 = 1, n_2 = 0)$ olabilir (2 kez katlı durum)

$n = 2$ için:

$(n_1 = 0, n_2 = 2), (n_1 = 1, n_2 = 1)$ veya $(n_1 = 2, n_2 = 0)$ (3 kez katlı durum)

olur. Bu değerler incelendiğinde, genel eğilim kolayca bulunur:

$n = n$ için: $n + 1$ kez katlı durum olacaktır.

(b) $n = 1$ ve $E_1 = 2\hbar\omega$ olan duruma $V = Kxy$ pertürbasyonu uygulandığında enerji özdeğerlerine katılacak W değerini bulmak üzere V_{ij} matris elemanlarını hesaplayalım. Dirac notasyonunda $u_{n_1} u_{n_2}$ durumu $|n_1\ n_2\rangle$ ket vektörüyle gösterilirse,

$$\begin{aligned}\langle n_1\ n_2|V|n_1'\ n_2'\rangle &= \iint dx\,dy\, u_{n_1}(x) u_{n_2}(y)\ [Kxy]\ u_{n_1'}(x) u_{n_2'}(y) \\ &= K \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_{n_1}(x)\, x\, u_{n_1'}(x) \int_{-\infty}^{\infty} dy\, u_{n_2}(y)\, y\, u_{n_2'}(y)\end{aligned}$$

olur. Harmonik salınıcı dalga fonksiyonları tek veya çift pariteye sahip olduğundan bu integraller $n_1 = n_1'$ ve $n_2 = n_2'$ için sıfır olacaklardır. Geriye kalan iki integral, simetriden dolayı aynı olup

$$\begin{aligned}\langle 10|V|01\rangle &= \langle 01|V|10\rangle = K \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_1(x)\, x\, u_0(x) \int_{-\infty}^{\infty} dy\, u_0(y)\, y\, u_1(y) \\ &= K \left[\int_{-\infty}^{\infty} dz\, u_0(z)\, z\, u_1(z)\right]^2 = K N_0 N_1 \left[\int_{-\infty}^{\infty} dz\, e^{-\alpha^2 z^2} (1)\, z\, (2\alpha z)\right]^2 \\ &= \frac{K}{2\alpha^2} = K\hbar/m\omega\end{aligned}$$

bulunur. Şimdi V_{ij} matrisini köşegenleştirebiliriz:

$$\det \begin{vmatrix} 0 - W & K/2\alpha^2 \\ K/2\alpha^2 & 0 - W \end{vmatrix} = 0$$

Bu denklemin kökleri $W = \pm K/2\alpha^2$ olur. O halde, $n = 1$ kuantum sayılı katlı durum, farklı enerjili iki duruma ayrılmış olur:

$$E_1 = \begin{cases} 2\hbar\omega + K\hbar/m\omega \\ 2\hbar\omega - K\hbar/m\omega \end{cases}$$

Bu W değerleri kullanılıp, dalga fonksiyonlarının süperpozisyonu hesaplanırsa, yeni

özdurumlar şöyle oluşur:

$$\psi_1(x,y) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |01\rangle) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle) \end{cases}$$

Alıştırma 7.5 : Zeeman Olayı. *Hidrojen atomundaki elektronun çekirdek etrafındaki hareketinden dolayı oluşan magnetik momenti*

$$\vec{M} = -\frac{e\hbar}{2m_e c}\vec{L} = -\mu_B \vec{L}$$

olarak verilir (Burada μ_B Bohr magnetonu, $\vec{L}$ açısal momentum vektörüdür). Bir $\vec{B}$ dış magnetik alanı ile bu magnetik momentin etkileşme enerjisi

$$V = -\vec{M}.\vec{B} = \mu_B\, \vec{B}.\vec{L}$$

olur. Zayıf bir magnetik alanda bu terimi pertürbasyon kabul ederek ε_n enerji özdeğerlerindeki değişmeyi hesaplayın.

Çözüm : Magnetik alanı $+z$ ekseni yönünde seçersek pertürbasyon terimi

$$V = \mu_B B L_z$$

olur. Enerji özdeğerlerine 1. dereceden pertürbasyon katkısı

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= (u_n, Vu_n) = \mu_B B\, (u_n, L_z u_n) \\ &= \iiint r^2 dr\, \sin\theta\, d\theta\, d\phi\, \psi^*_{nlm}(r,\theta,\phi)\, L_z \psi_{nlm}(r,\theta,\phi) \end{aligned}$$

Bu integrali hesaplamaya gerek yoktur. Çünkü, Bölüm 6 da görüldüğü üzere, kutupsal koordinatlarda $L_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$ yazılır ve dolayısıyla dalga fonksiyonunun sadece açısal kısmındaki ϕ değişkenli fonksiyona etki eder. Bunu da hesaplamak kolaydır:

$$L_z \Phi_m(\phi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}\, \mathrm{e}^{im\phi} = m\hbar\, \mathrm{e}^{im\phi} = m\hbar\, \Phi$$

O halde, L_z operatörünün sağındaki ψ_{nlm} dalga fonksiyonuna etkisi sadece bu $m\hbar$ çarpanını oluşturmaktır. Hidrojen atomu dalga fonksiyonlarının diklik bağıntısı da kullanılırsa

$$E_n^{(1)} = \mu_B B\, (u_n, L_z u_n) = m\hbar\mu_B B\, (u_n, u_n) = m\hbar\mu_B B$$

bulunur. O halde, yeni enerji özdeğerleri

$$E_n = \varepsilon_n + m\hbar\mu_B B \qquad (m = -l, \ldots, l)$$

olur. Bu sonuca göre, bir magnetik alanda $2l+1$ kere katlı olan hidrojen atomu enerji düzeylerindeki katlılık tamamen kalkar. Bu etki, *Zeeman olayı* olarak bilinir.

Gerçekte, elektronun yörüngesel magnetik momentine ek olarak bir de spin magnetik momenti vardır ve dış magnetik alanda o da etkileşir. Burada magnetik momentin sadece yörüngesel bileşenini gözönüne alarak bulduğumuz sonuca *Normal Zeeman olayı* denir.

Alıştırma 7.6: Bir Elektrik Alanında Hidrojen Atomu (Stark Olayı): $+z$ doğrultusunda düzgün bir $\mathscr{E}$ elektrik alanındaki hidrojen atomu, elektrik dipol etkileşmesi yoluyla, Coulomb potansiyeline ek olarak

$$V = e\mathscr{E}z = e\mathscr{E}\, r\cos\theta$$

potansiyel enerjisine sahiptir. $n = 2$ durumlarının enerjilerindeki değişmeyi hesaplayın.

Çözüm : Hidrojen atomu enerji düzeyleri

$$E_n = -\frac{R}{n^2} \qquad (R = me^4/\hbar^2 \ : \ \text{Rydberg sabiti})$$

ile verilir ve $n = 2$ durumu 4 kez katlıdır. Burada Dirac notasyonuna geçelim ve ψ_{nlm} özdurumlarını $|nlm\rangle$ ket vektörleriyle gösterelim. Aynı E_2 enerjili bu dört durum şunlardır:

$$\begin{aligned}
\psi_{200} &= |200\rangle \qquad (\ 2s \text{ durumu})\\
\psi_{21-1} &= |21{-}1\rangle \qquad (\ 2p \text{ durumu})\\
\psi_{210} &= |210\rangle \qquad (\quad ''\quad)\\
\psi_{211} &= |211\rangle \qquad (\quad ''\quad)
\end{aligned}$$

Pertürbasyon terimi V nin bu 4 boyutlu uzaydaki matris elemanlarının genel ifadesini yazalım:

$$\begin{aligned}
\langle nlm|V|n'l'm'\rangle &= \int d^3r\, \psi^*_{nlm}(r,\theta,\phi)\, e\mathscr{E}r\,\cos\theta\, \psi_{n'l'm'}(r,\theta,\phi)\\
&= e\mathscr{E}\int_0^\infty dr\, r^2\, R_{nl}(r)\, r\, R_{n'l'} \int d(\cos\theta)\, d\phi\, Y_l^{m^*}(\theta,\phi)\cos\theta\, Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi)
\end{aligned}$$

Bu 16 matris elemanından gerçekte sadece iki tanesinin sıfırdan farklı olduğu görülebilir. $V \simeq r\cos\theta$ operatöründe ϕ açısı olmadığı için, Küresel harmoniklerin diklik özelliğine göre, $(m \neq m')$ olan tüm matris elemanları sıfır olacaktır. Ayrıca, V hermitik ve reel olduğundan matris elemanları simetrik olur. Geriye kalan terimleri hesaplarsak (hidrojen atomu dalga fonksiyonları için Bölüm 6 ya bakın)

$$\begin{aligned}
\langle 200|V|210\rangle &= \langle 210|V|200\rangle\\
&= e\mathscr{E}\int_0^\infty dr\, r^2 R_{20}(r)\, r\, R_{21} \int d(\cos\theta) d\phi\, Y_0^{0^*}(\theta,\phi)\cos\theta\, Y_1^0(\theta,\phi)\\
&= \frac{ea\mathscr{E}}{32\pi}\int_0^\infty d\rho\, \rho^4(2-\rho)\, e^{-\rho} \int_{-1}^1 d\mu\, \mu^2 \int_0^{2\pi} d\phi = -\frac{e\mathscr{E}\hbar^2}{me} = -3ea\mathscr{E}
\end{aligned}$$

Bu değerlerle 4×4 matris oluşturulur ve W özdeğerleri için determinant denklemi yazılır:

$$\det\begin{vmatrix} 0-W & 0 & -3ea\mathscr{E} & 0\\ 0 & 0-W & 0 & 0\\ -3ea\mathscr{E} & 0 & 0-W & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0-W \end{vmatrix} = 0$$

Bu denklemin kökleri

$$W = 0, 0, +ea\mathscr{E}, -ea\mathscr{E}$$

olur. 4 kez katlı E_2 enerji düzeyi böylece 3 farklı enerjiye sahip 3 düzeye ayrışır:

$$E_2 = \begin{cases} \varepsilon_2 + ea\mathscr{E} \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_2 - ea\mathscr{E} \end{cases} \qquad \text{(hala iki kez katlı durum)}$$

Pertürbasyon terimi ϕ açısına bağlı olmadığından, $m = \pm 1$ olan durumlar hala katlıdırlar.

7.2 VARYASYON YÖNTEMİ

Varyasyon yöntemi, taban durumu enerjisini minimize ederek bulmayı amaçlayan bir yöntemdir. Pertürbasyon yönteminin uygulanamadığı, yani hamiltonyenin $H = H_0 + V$ gibi iki terime ayrılamadığı durumlarda uygulanabilir.

Bir H hamiltonyeninin özdeğerleri E_n ve özvektörleri $\{u_n\}$ olsun. Taban durumu için

$$Hu_0 = E_0 u_0 \qquad \text{veya} \qquad E_0 = (u_0, Hu_0)$$

olduğu açıktır.

Bu sistemin herhangi bir ψ durumunda hamiltonyenin beklenen değeri için daima şu eşitsizlik yazılabilir:

$$E = \langle H \rangle = \frac{(\psi, H\psi)}{(\psi, \psi)} \geq E_0 \tag{7.11}$$

(ψ fonksiyonu normlanmışsa payda bire eşit olur). Eşitlik ancak $\psi = u_0$ olduğunda mümkündür.

Bu eşitsizliğin ispatı kolaydır. Her ψ durumu $\{u_i\}$ özvektörlerinin süperpozisyonu olarak yazılabileceği için

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_{i=0}^{\infty} c_i u_i \qquad \sum_i |c_i|^2 = 1 \quad \text{(normlanmış } \psi \text{ durumu alıyoruz)} \\ E &= (\psi, H\psi) = \sum_i \sum_j c_i^* c_j \, (u_i, Hu_j) \\ &= \sum_i \sum_j c_i^* c_j \, E_j (u_i, u_j) = \sum_i \sum_j c_i^* c_j \, E_j \delta_{ij} = \sum_i c_i^* c_i \, E_i \\ E &= \sum_i |c_i|^2 E_i \end{aligned}$$

olur. Taban durumu her zaman diğer durumlardan daha küçük enerjili ($E_0 \leq E_i$) olduğu için, serinin her teriminde E_i yerine E_0 alırsak eşitliğin sağ tarafı küçülür:

$$\begin{aligned} E &\geq \sum_i |c_i|^2 E_0 = E_0 \sum_i |c_i|^2 \\ E &\geq E_0 \end{aligned}$$

Bu eşitsizliğe göre E değeri ne kadar aşağıya çekilebilirse, taban durumuna o kadar yaklaşılmış olur. Seçilen ψ dalga fonksiyonu (buna *deneme fonksiyonu* denir) bir a parametresi içeriyorsa, bulunan E değeri de bu a parametresine bağlı olur. O halde, E değeri bu a parametresine göre minimize edilerek taban durumuna iyice yaklaşılır:

$$\begin{aligned} \psi &= \psi(\vec{r},a) \\ E(a) &= \frac{(\psi,H\psi)}{(\psi,\psi)} \\ \frac{\partial E}{\partial a} &= 0 \end{aligned}$$

Bu yöntem daha genel olarak, $(a_1,a_2,\ldots,a_n)$ gibi birden çok parametreyle uygulanabilir.

Alıştırma 7.7: (a) Tek boyutlu harmonik salınıcı için aşağıdaki deneme fonksiyonlarının herbiri için taban durumu enerjisini bulun:

(a) $\psi = \mathrm{e}^{-ax^2}$

(b) $\psi = \begin{cases} \cos(\pi x/2a) & -a \le x \le a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$

Çözüm : (a) Harmonik salınıcı hamiltonyeni

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

için gerekli beklenen değer hesaplanır:

$$\begin{aligned} (\psi,H\psi) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \mathrm{e}^{-ax^2}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\mathrm{e}^{-ax^2} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \mathrm{e}^{-ax^2}\left[\frac{2a\hbar^2}{2m}(1-2ax^2) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\mathrm{e}^{-ax^2} \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2a}}\left(\frac{a\hbar^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{8a}\right) \\ (\psi,\psi) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \mathrm{e}^{-2ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{2a}} \end{aligned}$$

Buna göre E ifadesi

$$E = \frac{(\psi,H\psi)}{(\psi,\psi)} = \frac{a\hbar^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{8a}$$

olur. Bu ifadeyi minimum yapan a değerinde türevin sıfır olması gerekir:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial a} &= \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8a^2} = 0 \\ a &= \frac{m\omega}{2\hbar} \end{aligned}$$

bulunur. Bu a değerini E ifadesinde kullanırsak, taban durumu enerjisi

$$E = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

bulunur. Görüldüğü gibi, bu özel örnekte, taban durumu tam olarak bulunabilmektedir, çünkü seçtiğimiz deneme fonksiyonu zaten harmonik salınıcının taban durumu özfonksiyonu idi.

(b) Şimdi deneme fonksiyonu olarak, Gauss fonksiyonuna çok benzeyen, kosinüs fonksiyonunun yarısını alalım. Buna göre

$$\begin{aligned}
(\psi,\psi) &= \int_{-a}^{a} dx \cos^2\frac{\pi x}{2a} = a \\
(\psi,H\psi) &= \int_{-a}^{a} dx \cos\frac{\pi x}{2a}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\cos\frac{\pi x}{2a} \\
&= \int_{-a}^{a} dx \left[\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\cos^2\frac{\pi x}{2a} \\
&= \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma} + \left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right)m\omega^2a^3
\end{aligned}$$

olur. Buradan, taban durumu enerjisi a parametresine bağlı olarak

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2} + \left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right)m\omega^2a^2$$

bulunur. Bu ifadeyi minimum yapan a değeri

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial a} &= -\frac{\hbar^2\pi^2}{4ma^3} + 2m\omega^2a\left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right) = 0 \\
a^2 &= \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}\sqrt{\frac{3}{4(\pi^2-6)}}
\end{aligned}$$

alınıp enerji ifadesinde kullanılırsa

$$\begin{aligned}
E &= \frac{1}{2}\left(\frac{\pi^2-6}{3}\right)^{1/2}\hbar\omega \\
&= 0.568\,\hbar\omega
\end{aligned}$$

bulunur. Bu sonuç % 14 hata ile $\hbar\omega/2$ değerini verebilmektedir.

7.3 ZAMANA BAĞIMLI PERTÜRBASYON TEORİSİ

Bir sistemin hamiltonyeni zamana bağımlı bir pertürbasyon terimi içeriyorsa

$$H = H_0 + V(t)$$

o zaman kararlı durumlar oluşmaz. Örneğin, bir atom değişken bir elektromagnetik alan içine konduğunda uyarılmış bir düzeye geçiş yapabilir veya iyonize olabilir. Veya, atomun yakınından geçen yüklü bir parçacık tarafından saçılmaya uğrayabilir. Tüm bu örneklerde, belirli bir zaman aralığında olup biten bir pertürbasyon sözkonusudur. Bu tür olaylarda belirleyici fiziksel büyüklükler *geçiş olasılığı* veya *tesir kesiti* gibi kavramlardır.

Zamana bağlı Schrödinger denklemini ele alalım:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = [H_0 + V(t)]\psi(\vec{r},t) \tag{7.12}$$

Bu denklemin çözümünü H_0 hamiltonyeninin kararlı durumları cinsinden arayalım:

$$\begin{aligned} H_0 u_n(\vec{r}) &= E_n u_n(\vec{r}) \\ \psi(\vec{r},t) &= \sum_n a_n(t)\, u_n(\vec{r}) \end{aligned} \tag{7.13}$$

Yani, yine $\{u_i\}$ bazında bir seri açılımı olarak yazalım ancak, bu kez katsayılar t zamanının bir fonksiyonu olsun. Eğer pertürbasyon terimi $V = 0$ olsaydı, bu $a_n(t)$ katsayıları (bkz. Bölüm 3) $\exp(-iE_nt/\hbar)$ olurlardı. O halde, bu üstel faktörü de ayırıp, yeni $c_n(t)$ katsayıları tanımlayalım:

$$\begin{aligned} a_n(t) &= c_n(t)\, \mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar} \\ \psi(\vec{r},t) &= \sum_n c_n(t)\, \mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}\, u_n(\vec{r}) \end{aligned} \tag{7.14}$$

Bu çözümler Schrödinger denkleminde yerine konursa

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n c_n(t)\, \mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}\, u_n(\vec{r}) = [H_0 + V]\sum_n c_n(t)\, \mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}\, u_n(\vec{r})$$

$$i\hbar\sum_n \frac{dc_n}{dt}u_n \mathrm{e}^{-\frac{iE_nt}{\hbar}} + \sum_n c_n E_n u_n\, \mathrm{e}^{-\frac{iE_nt}{\hbar}} = \sum_n c_n E_n u_n\, \mathrm{e}^{-\frac{iE_nt}{\hbar}} + \sum_n c_n \mathrm{e}^{-\frac{iE_nt}{\hbar}} V u_n$$

$$i\hbar\sum_n \frac{dc_n}{dt}u_n \mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar} = \sum_n c_n(t)\, \mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar} V(t)\, u_n$$

Bu denklemin bir u_f özfonksiyonuyla skaler çarpımı alınırken $(u_f, u_n) = \delta_{fn}$ ve $H_0 u_f = E_f u_f$ ifadeleri kullanılırsa

$$\begin{aligned} \frac{dc_f}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}\sum_n V_{fn}(t)\, \mathrm{e}^{i\omega_{fn}t}\, c_n(t) \\ \hbar\omega_{fn} &= (E_f - E_n) \end{aligned}$$

bulunur. Burada ω_{fn}, $(n \to f)$ geçişi için *Bohr frekansı* olarak tanımlanır. V_{fn} ise pertürbasyon potansiyelinin bu iki durum arasındaki matris elemanıdır:

$$V_{fn}(t) = (u_f, V\, u_n) \tag{7.15}$$

c_n katsayılarını veren bu 1.dereceden diferansiyel denklem sistemi, aslında zamana bağımlı Schrödinger denkleminin başka türlü bir ifadesidir. Her diferansiyel denklem sisteminde olduğu gibi, burada da başlangıç koşulları verilmelidir. Problemin matematiğini

basite indirgeyebilmek için, $t = 0$ anında sistemin, $u_l(\vec{r})$ özdurumunda olduğunu varsayalım. O halde, $t = 0$ anında $c_l(0)$ hariç tüm diğer indisli katsayılar sıfır olacaklardır:

$$\begin{aligned} c_l(0) &= 1 \\ c_f(0) &= 0 \quad (f \neq i) \end{aligned}$$

Bu aşamada yaklaşık ifadelere geçebiliriz. Eğer $V(t)$ pertürbasyonu zayıf ise ve kısa bir $[0,t]$ aralığında etki ediyorsa, tüm c_f katsayılarının (c_i hariç) sabit kaldıklarını varsayalım. Buna göre, yukardaki diferansiyel denklem

$$\begin{aligned} (f = i) \quad &: \quad \frac{dc_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} V_{ii}(t)\, c_i \\ (f \neq i) \quad &: \quad \frac{dc_f}{dt} = \frac{1}{i\hbar} V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}t}\, c_i \end{aligned}$$

olur. 1. denklemin çözümü

$$c_i(t) = e^{\left[(1/i\hbar)\int_0^t V_{ii}(t)\, dt\right]} \simeq 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t V_{ii}(t)\, dt$$

(Pertürbasyonun zayıf olması nedeniyle üstel terimi yaklaşık olarak yazdık). c_i için bulduğumuz bu ifadeyi 2. denklemde kullanırken sadece 1. terimini alıp bunun yanındakini ihmal edebiliriz:

$$\frac{dc_f}{dt} = \frac{1}{i\hbar} V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}t}\, c_i \simeq \frac{1}{i\hbar} V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}t}$$

Sonuç olarak, c_f katsayıları yazılabilir:

$$\boxed{c_f(t) \simeq \frac{1}{i\hbar}\int_0^t V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}t}\, dt} \tag{7.16}$$

Bu katsayılar yardımıyla bir i ilk durumundan f son durumuna *geçiş olasılığı* tanımlanırsa

$$\boxed{P_{i\to f}(t) = |c_f(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}t}\, dt\right|^2} \tag{7.17}$$

olur. Şimdi bu sonuçların basit uygulamalarını inceleyelim.

7.3.1 HARMONİK PERTÜRBASYON

$t = 0$ anında başlatılan ve harmonik olarak şiddeti değişen bir pertürbasyon düşünelim:

$$V(\vec{r},t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ 2\mathcal{V}(\vec{r}) \cos \omega t & t \geq 0 \end{cases}$$

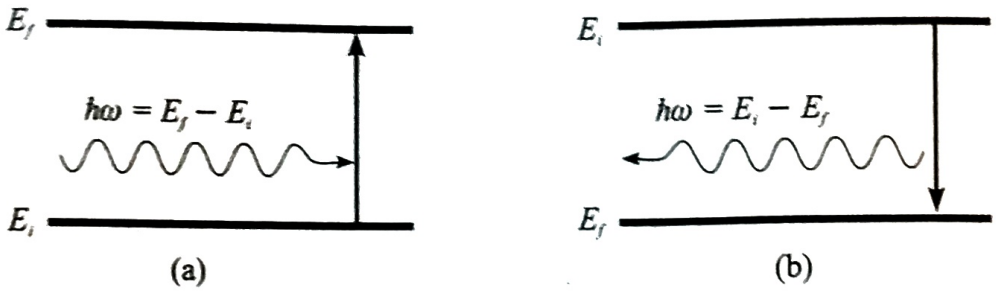
Böyle bir pertürbasyonun en önemli uygulaması salınan bir elektromagnetik alanla, yani bir elektromagnetik dalga ile etkileşen atomun uyarılmış durumlara geçişidir. Karacisim ışıması, lazerlerde kullanılan uyumlu radyasyonun üretilmesi gibi uygulamaları da birer harmonik pertürbasyon gibi görmek mümkündür.

Bu pertürbasyon ifadesi için geçiş katsayıları $c_f(t)$ leri hesaplarsak

$$\begin{aligned} c_f(t) &= \frac{1}{i\hbar}\int_0^t [2\mathcal{V}_{fi}\cos\omega t]e^{i\omega_{fi}t}\,dt \\ &= \frac{1}{i\hbar}\mathcal{V}_{fi}\int_0^t (e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})e^{i\omega_{fi}t}\,dt \\ c_f(t) &= -\frac{\mathcal{V}_{fi}}{\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}-1}{\omega_{fi}+\omega}+\frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}-1}{\omega_{fi}-\omega}\right] \end{aligned} \tag{7.18}$$

Bu ifadenin paydasındaki terimlere dikkat edersek, köşeli parantez içindeki ifadenin 1. teriminin $\omega=-\omega_{fi}$ de maksimum olduğu ve diğer bölgelerde çok küçük olduğu görülür. Benzer şekilde, 2. terim $\omega=\omega_{fi}$ için maksimum olur. O halde c_f katsayısına en fazla katkı $\omega\simeq\pm\omega_{fi}$ olduğunda gelecektir. *Rezonans frekansları* denilen bu değerlere karşılık gelen enerjiler

$$\begin{aligned} \omega &\simeq +\omega_{fi} \longrightarrow E_f = E_i+\hbar\omega \\ \omega &\simeq -\omega_{fi} \longrightarrow E_f = E_i-\hbar\omega \end{aligned}$$



Şekil 7.2: Harmonik pertürbasyonda geçişler. (a) Rezonans soğurması, (b) Uyartmalı geçiş.

1. denkleme göre sistem, elektromagnetik alandan $\hbar\omega$ kadar enerjili bir foton alarak E_i enerjili ilk durumdan $E_f=E_i+\hbar\omega$ enerjili bir son duruma geçiş yapmaktadır (Şekil 7.2a). Buna *rezonans soğurması* denir.

2. denkleme göre ise, sistem $\hbar\omega$ kadar enerjili bir foton yayınlayarak E_i enerjili bir ilk durumdan $E_f=E_i-\hbar\omega$ enerjili bir son duruma inmektedir (Şekil 7.2b). Bu fotonun yayınlanması elektromagnetik alan tarafından başlatıldığı için buna *uyartmalı geçiş* denir.

Yukardaki $c_f(t)$ ifadesinde $\omega\simeq+\omega_{fi}$ alalım, yani sadece rezonans soğurması durumunu inceleyelim. Bu durumda 2. terim daha büyük olacaktır ve diğer terimi ihmal edebiliriz. Buna göre

$$c_f(t)\simeq -\frac{\mathcal{V}_{fi}}{\hbar}\,\frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}-1}{\omega_{fi}-\omega}$$

olur. Bu ifadedeki kompleks üstel fonksiyonu

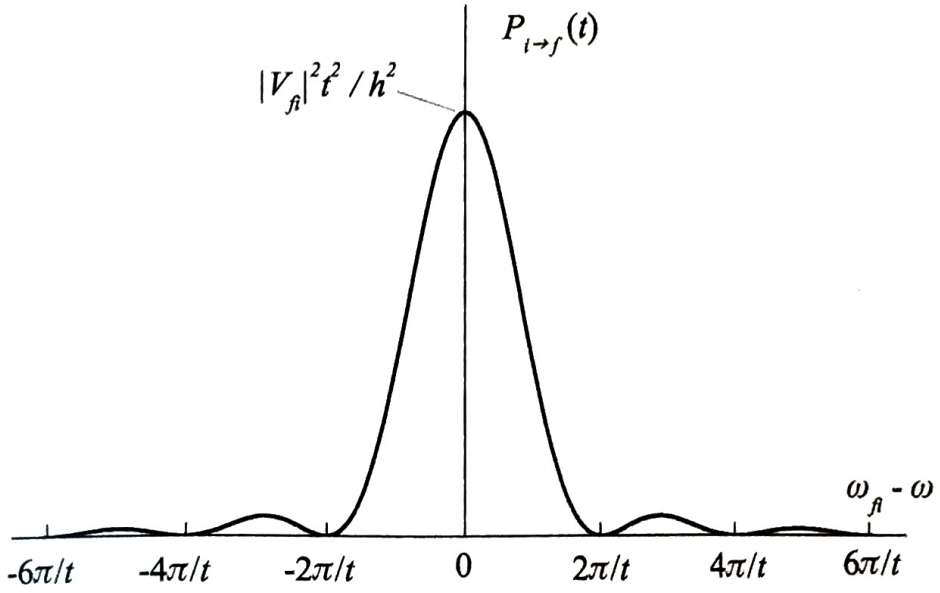
$$e^{i\alpha}-1=2i\,e^{i\alpha/2}\sin(\alpha/2)$$

bağıntısı kullanarak yazarsak

$$c_f(t) = -\frac{2i\,\mathcal{V}_{fi}}{\hbar}\,\frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t/2}\sin[(\omega_{fi}-\omega)t/2]}{\omega_{fi}-\omega}$$

$$P_{i\to f}(t) = |c_f(t)|^2 = \frac{4\,|\mathcal{V}_{fi}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2[(\omega_{fi}-\omega)t/2]}{(\omega_{fi}-\omega)^2} \tag{7.19}$$

bulunur.



Şekil 7.3: $(i \to f)$ geçiş olasılığının frekansa bağımlılığı.

Şekil 7.3 de geçiş olasılığının grafiği verilmiştir. Olasılığın maksimum değerinin t^2 ye orantılı, pik genişliğinin de $1/t$ ye orantılı olduğuna dikkat edelim.

Bu ifade belirli bir t anındaki olasılığı vermektedir. Uzun süre beklendiğinde bu olasılık ne olur? Şekil 7.3 ye göre pik genişliği küçülürken yüksekliği artar. Limit değerini bulmak üzere $t \to \infty$ alalım. Bölüm 3 de gördüğümüz Dirac delta fonksiyonu temsillerinden biri buraya uygulanırsa

$$\begin{aligned} \delta(\omega) &= \frac{2}{\pi}\lim_{t\to\infty}\frac{\sin^2(\omega t/2)}{\omega^2 t} \\ P_{i\to f}(t) &= \frac{2\pi t}{\hbar^2}\,|\mathcal{V}_{fi}|^2\,\delta(\omega_{fi}-\omega) \end{aligned} \tag{7.20}$$

yazılabilir. Buradaki delta fonksiyonu enerji korunumunun bir ifadesidir.

Spektroskopide çok kullanılan *geçiş oranı* kavramı burada hesaplanırsa

$$w_{if}(t) = \frac{dP_{if}}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |\mathcal{V}_{fi}|^2 \, \delta(\omega_{fi} - \omega) \qquad \text{bulunur.} \tag{7.21}$$

Genellikle, kuantum sistemlerin uyarılmış durumları enerjileri keskin aralıklarlarla sıralanmış olmayıp, belirli bantlarda sürekli değişen enerjili birçok durumdan oluşur. Bunun birçok nedenleri vardır. Örneğin, bir gazdaki termal çalkantılar nedeniyle atomlar (kendi referans sistemlerinde) gelen pertürbasyonun frekansını, olduğundan daha küçük veya daha büyük görürler (Doppler kayması). Laboratuar referans sisteminde bu, atomik enerji düzeylerinin genişlemesi demektir. Diğer bir neden, atomların bir dış etken olmadan da *kendiliğinden geçiş* yapabilmeleridir. Tüm bunların sonucu E_i ve E_f enerji düzeyleri bir aralığa yayılacak, ve dolayısıyla frekans farkı ω_{fi} da yayılacaktır.

Tanım olarak, $E_f - E_i = \hbar\omega_{fi}$ enerji farkına karşılık gelen f durumlarının birim frekans aralığındaki sayısına *durum yoğunluğu* denir ve $g(\omega_{fi})$ ile gösterilir. Küçük bir $d\omega_{fi}$ aralığındaki durumların sayısı $g(\omega_{fi})d\omega_{fi}$ olur. Ayrıca, $\mathcal{V}_{fi}$ matris elemanlarının bu durumların hepsi için aynı olduğu varsayılırsa, tüm bu durumlara geçiş olasılıkları toplamı bir integrale dönüştürülebilir:

$$\begin{aligned} P(t) &= \sum_f P_{i\to f} \simeq \int P_{i\to f}\, g(\omega_{fi})\, d\omega_{fi} \\ &= \frac{|\mathcal{V}_{fi}|^2}{\hbar^2} \int \frac{\sin^2[(\omega_{fi}-\omega)t/2]}{[(\omega_{fi}-\omega)/2]^2}\, g(\omega_{fi})\, d\omega_{fi} \end{aligned}$$

yazılabilir. İntegral içindeki çarpanlardan $g(\omega_{fi})$, diğer $\sin^2 u/u^2$ faktörüne oranla daha yavaş değişen bir fonksiyondur. Şekil 7.3 de bu sinüslü faktörün $\omega = \omega_{if}$ değerinde sivrildiği görülmüştü. Buna göre, yaklaşık olarak $g(\omega_{if}) \simeq g(\omega)$ alıp bu çarpanı integral dışına çıkarabiliriz:

$$P(t) = \frac{|\mathcal{V}_{fi}|^2}{\hbar^2}\, g(\omega) \int \frac{\sin^2[(\omega_{fi}-\omega)t/2]}{[(\omega_{fi}-\omega)/2]^2}\, d\omega_{fi}$$

Bu integralin değeri 2π olarak bulunur. Sonuç olarak, geçiş olasılığı ve oranı yazılabilir:

$$P(t) = \frac{2\pi|\mathcal{V}_{fi}|^2}{\hbar^2}\, g(\omega)\, t \tag{7.22}$$

$$w = \frac{2\pi}{\hbar^2} |\mathcal{V}_{fi}|^2 g(\omega) \tag{7.23}$$

Bu formüle *Fermi'nin altın kuralı* adı verilir. Atomik geçişlerde ve saçılma teorisinde bir çok uygulaması vardır. Burada hatırlanması gereken önemli nokta, geçiş oranının matris elemanının karesine ve durum yoğunluğuna bağlı oluşudur.

7.3.2 GEÇİŞ KURALLARI

Şimdi, buraya kadar bulduğumuz sonuçları atomların radyasyonları yayınlama ve soğurmasına uygulayalım. Geçiş oranı w, spektrumdaki çizgilerin ışık şiddetini belirler.

Geçiş oranı pertürbasyon teriminin matris elemanının karesiyle orantılıdır. Bu $\mathcal{V}_{if}$ matris elemanı herhangi bir nedenle sıfır oluyorsa, o takdirde $(i \to f)$ geçişi gerçekleşmez (*yasak geçiş*). Verilen bir sistemde, hangi geçişlerin gerçekleşebileceği bir takım *geçiş kuralları* ile saptanabilir. Bu kısımda, hidrojen atomu için geçiş kurallarını inceleyeceğiz.

Frekansı ω ve dalgasayısı vektörü $\vec{k}$ olan bir elektrik alanı

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \cos(\vec{k}.\vec{r} - \omega t)$$

olarak alalım. Bir elektrik alandaki yüklerin potansiyel enerjisi

$$\mathcal{V} = -\sum_i q_i \vec{r}_i.\vec{E}$$

olur. Hidrojen atomu çekirdeğini orijinde, elektronu ise $\vec{r}$ konumunda alırsak

$$\mathcal{V} = e\vec{r}.\vec{E}$$

yazılabilir. Özel bir durum olarak, elektrik alan vektörü $+z$ yönünde seçilirse

$$\mathcal{V} = e\mathcal{E}z = e\mathcal{E}_0 z \cos(\vec{k}.\vec{r} - \omega t)$$

Eğer elektromagnetik alanın dalgaboyu atomun boyutlarından büyük ise, k dalgasayısı ve dolayısıyla $(\vec{k}.\vec{r})$ çarpanı küçük olur ve yaklaşık olarak $\mathcal{E}_0 \cos(\vec{k}.\vec{r} - \omega t) \approx \mathcal{E}_0 \cos\omega t$ alınabilir:

$$\mathcal{V} \approx e\mathcal{E}_0 z \cos\omega t$$

Başka bir deyişle, atomun boyutları içinde düzgün bir elektrik alan vardır. Bu yaklaşık etkileşmeye *dipol etkileşmesi* denir.

Pertürbasyon teriminin matris elemanlarını yazalım. H_0 hidrojen atomunun ilk durumu $\{n,l,m\}$, son durumu $\{n',l',m'\}$ kuantum sayılarıyla gösterilirse

$$\mathcal{V}_{fi} = \langle n'l'm'|\mathcal{V}|nlm\rangle = e\mathcal{E}_0 \int dV\ \psi^*_{n'l'm'}(r,\theta,\phi)\, z\, \psi_{nlm}(r,\theta,\phi)$$

olur. $z = r\cos\theta = r\mu$ alınıp dalga fonksiyonlarının radyal ve açısal kısımları ayrılırsa (normlanmayı gözönüne almayalım)

$$\mathcal{V}_{fi} \propto e\mathcal{E}_0 \int_0^\infty dr\, r^2 R_{n'l'} r R_{nl} \int_{-1}^{1} d\mu P_{l'}^{m'}(\mu)\, \mu\, P_l^m(\mu) \int_0^{2\pi} d\phi\, e^{-im'\phi}\, e^{im\phi}$$

Bu ifadeye göre, bir geçişin gerçekleşebilmesi için bu üç integralin de sıfırdan farklı olması gerekir. Önce ϕ değişkenli integrali ele alırsak, bunun sıfırdan farklı olabilmesi için $m' = m$, yani iki durum arasında $\Delta m = m' - m = 0$ olmalıdır.

Bu hesapta elektrik alanın z- doğrultusunda olduğu varsayılmıştı. Elektrik alanı x- veya y- doğrultusunda varsayıp matris elemanlarını hesaplasaydık, magnetik kuantum sayıları için $\Delta m = m' - m = \pm 1$ olması gerektiği ortaya çıkardı.

Bağlı Legendre polinomları için şu eşitliğin doğru olduğu ispatlanabilir:

$$\mu P_l^m(\mu) = \frac{l-m+1}{2l+1} P_{l+1}^m(\mu) + \frac{l+m}{2l+1} P_{l-1}^m(\mu)$$

Bu ifadeyi ve $(m' = m)$ değerini kullanırsak θ integrali iki terime ayrılır:

$$\frac{l-m+1}{2l+1}\int_{-1}^{1} d\mu\, P_{l'}^{m}(\mu)P_{l+1}^{m}(\mu) + \frac{l+m}{2l+1}\int_{-1}^{1} d\mu\, P_{l'}^{m}(\mu)P_{l-1}^{m}(\mu)$$

Bağlı Legendre polinomlarının diklik bağıntısına göre, bu integrallerin sıfırdan farklı olabilmesi için ya $l' = l+1$, yahut da $l' = l-1$ olmalıdır. Buradan $\Delta l = l' - l = \pm 1$ olması gerektiği ortaya çıkar.

Ancak, temel kuantum sayısı n için böyle bir kural çıkaramayız, çünkü yukardaki integrallerden birincisi daima sonlu değer verir.

Sonuç olarak, bir elektrik alanda hidrojen atomunun *elektrik dipol geçişi* yapabilmesi için, başlangıç ve bitiş durumlarının kuantum sayıları arasında şu bağıntılar olmalıdır:

$$\boxed{\Delta l = \pm 1 \qquad \Delta m = 0, \pm 1} \tag{7.24}$$

7.4 İKİ ÖZEL YAKLAŞIK YÖNTEM

Zamana bağımlı pertürbasyon teorisi genelde karmaşık olmakla beraber, iki özel durumda kolay uygulanabilir sonuçlara götürür. Pertürbasyon etkisinin zaman içinde çok yavaş veya çok hızlı oluşuna göre bu iki uç durumu burada inceleyelim.

7.4.1 ADYABATİK PERTÜRBASYON

$V(t)$ pertürbasyon terimi t değişkenine bağlı olarak çok yavaş bir şekilde değişiyorsa

$$H = H_0 + V(t)$$

hamiltonyenine, verilen bir t anında sabitmiş gözüyle bakılabilir. Böylece, Schrödinger denklemi zamandan bağımsızmış gibi çözülebilir.

Tekrar $c_f(t)$ ifadesine bakalım:

$$c_f(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t V_{fi}(t')e^{i\omega_{fi}t'}\, dt'$$

Kısmi integrasyon sonucu

$$c_f(t) = -\frac{1}{\hbar\omega_{fi}}\left[V_{fi}(t)e^{i\omega_{fi}t} - \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'}\frac{\partial V_{fi}}{\partial t'}\, dt'\right]$$

olur. $V_{fi}(t)$ yavaş değişiyorsa $\partial V_{fi}/\partial t'$ çok daha yavaş değişecektir. O halde, ikinci terimi ihmal edersek

$$c_f(t) \simeq -\frac{1}{\hbar\omega_{fi}}V_{fi}(t)e^{i\omega_{fi}t} = \frac{V_{fi}}{\varepsilon_i - \varepsilon_f}e^{i\omega_{fi}t} \qquad \text{yazılabilir.}$$

$t = 0$ anında sistemin u_i özdurumunda olduğunu hatırlarsak ($c_i(0) = 1$), zamana bağımlı genel çözüm

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r},t) &= \sum_n c_n(t)\, u_n(\vec{r})\, e^{-i\omega_n t} \\ &= u_i\, e^{-i\omega_i t} + \sum_{f\neq i} c_f(t)\, u_f e^{-i\omega_f t} \\ &= u_i\, e^{-i\omega_i t} + \sum_{f\neq i} \frac{V_{fi}}{\varepsilon_i - \varepsilon_f}\, u_f e^{i[-\omega_f + (\omega_f - \omega_i)]t} \\ &= \left[u_i + \sum_{f\neq i} \frac{V_{fi}}{\varepsilon_i - \varepsilon_f}\, u_f\right] e^{-i\omega_i t}\end{aligned}$$

olur. Köşeli parantez içindeki ifade, zamandan bağımsız 1. derece pertürbasyon çözümüdür. Aradaki tek fark, bu ifadenin her t anında geçerli oluşudur.

Sonuç olarak, $V(t)$ pertürbasyonu yavaş değişiyorsa, Schrödinger denklemi

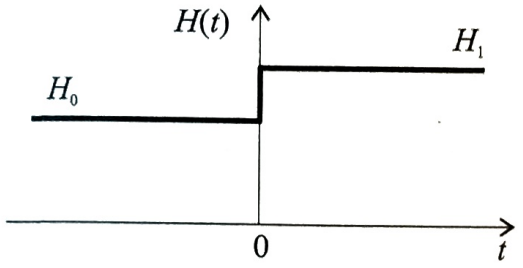
$$\begin{aligned}H(t) &= H_0 + V(t) \\ H(t)\psi(t) &= E_n(t)\, \psi_n(t)\end{aligned}$$

her t anında (sanki t bir parametreymiş gibi) çözülebilir. Sistem başlangıçta n kuantum sayılı bir $\psi_n(0)$ durumundaysa, daha sonraki bir t anında, yine aynı kuantum sayılı $\psi_n(t)$ durumunda olacaktır. Enerji özdeğeri $E_n(t)$ de benzer şekilde, bu t parametresine bağlı olarak değişecektir.

Adyabatik pertürbasyon denilen bu yöntemde durumlar arasında geçiş olanağı yoktur.

7.4.2 ANİ PERTÜRBASYON

Bir sistemin $t < 0$ olduğu anlarda sabit bir H_0 hamiltonyenine göre davranırken, $t = 0$ anında birdenbire, H_1 hamiltonyenine geçtiğini ve H_1 hamiltonyeninin de zaman içinde sabit kaldığını varsayalım (Şekil 7.4).



Şekil 7.4: Ani pertürbasyon.

$$H(t) = \begin{cases} H_0 & t < 0 \\ H_1 & t \geq 0 \end{cases}$$

H_0 ve H_1 hamiltonyenleri için özdeğer probleminin bilindiğini varsayalım:

$$\begin{aligned}H_0 u_n &= \varepsilon_n^0 u_n \\ H_1 v_m &= \varepsilon_m^1 v_m\end{aligned}$$

Burada ilgilendiğimiz soru şudur: "*Bir sistem başlangıçta H_0 hamiltonyeninin bir u_i özdurumunda iken, ani pertürbasyon sonucu, H_1 hamiltonyeninin v_f özdurumuna geçme olasılığı nedir?*"

Başlangıç dalga fonksiyonunu yazalım:

$$\psi(\vec{r},0) = u_i(\vec{r})$$

$t > 0$ anlarında, sistemin en genel durumu H_1 hamiltonyeninin özdurumlarının bir süperpozisyonu olacaktır:

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_f c_f e^{-e_f^1 t/\hbar}\, v_f(\vec{r})$$

Burada H_1 hamiltonyeni sabit olduğundan c_f katsayıları da zamandan bağımsız olacaktır.

Her ne kadar $H(t)$ hamiltonyeninde süreksiz bir değişim oluyorsa da, dalga fonksiyonunun olasılık yorumuna göre, her $\vec{r}$ konumlu yerde ve her t anında sürekli olması gerektiğini görmüştük. Özel olarak, $t = 0$ anında

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r},0) &= \psi(\vec{r},0) \\ u_i(\vec{r}) &= \sum_f c_f v_f(\vec{r}) \end{aligned}$$

olmalıdır. c_f katsayıları, skaler çarpım alınarak bulunursa, sonuç olarak $(i \to f)$ geçiş olasılığını yazabiliriz:

$$\begin{aligned} c_f &= \langle v_f | u_i \rangle = \int_V dV\, v_f^*(\vec{r})\, u_i(\vec{r}) \\ P_{i\to f} &= |c_f|^2 = |\langle v_f | u_i \rangle|^2 \end{aligned} \tag{7.25}$$

Alıştırma 7.8 : *Bir parçacık $t = 0$ anında L_0 genişliğinde bir sonsuz kuyu potansiyelinin taban durumunda iken, kuyu genişliği $L(t)$ şeklinde yavaşça değişmeye başlıyor. (a) Parçacığın enerjisi ve dalga fonksiyonunun nasıl değiştiğini hesaplayın. (b) Duvar genişlerken parçacığın yaptığı iş ne olur?*

Çözüm : Bu bir adyabatik pertürbasyon olduğu için, kuyu genişliği değişse bile, parçacık hep taban durumunda ($n = 1$) kalacaktır. O halde, kuyu potansiyeli için bulduğumuz ifadelerin herbiri t anında $L(t)$ genişliğindeki kuyu için de geçerlidir:

$$\begin{aligned} u_1(x,t) &= \sqrt{\frac{2}{L(t)}} \sin\frac{\pi x}{L(t)} \\ \varepsilon_1(t) &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL(t)^2} \end{aligned}$$

(b) L arttıkça parçacığın enerjisi azalacaktır. Başlangıçtaki ($t = 0$) enerji ile bir t anındaki enerji arasındaki fark duvar üzerinde yapılan iştir:

$$W = \varepsilon_1(0) - \varepsilon_1(t)$$

Alıştırma 7.9: Hidrojen atomunun ^3H izotopu, β-bozunması sonucu aniden $^3He^+$ iyonuna dönüşüyor. Başlangıçta ^3H atomu taban durumundaysa, bozunma sonucu He iyonunu taban durumunda bulma olasılığı nedir?

Çözüm: Başlangıçtaki H_0 ve sondaki H_1 hamiltonyenleri arasındaki tek fark, çekirdek yükünün aniden $Z = 1$ den $Z = 2$ ye değişmiş olmasıdır. O halde, hidrojen atomu dalga fonksiyonları, bu Z farkı gözönüne alınarak her iki durum için de yazılabilir:

$$\psi_{100} = 2\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-Zr/a}$$

$$u_i = 2\left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} e^{-r/a}, \qquad v_f = 2\left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} e^{-2r/a}$$

Buradan, geçiş olasılığı hesaplanır:

$$P_{i\to f} = |\langle v_f|u_i\rangle|^2$$

$$= \left|\frac{8\sqrt{2}}{a^3}\int_0^\infty dr\, r^2\, e^{-3r/a}\right|^2 = \left|\frac{16\sqrt{2}}{3^3}\right|^2 \simeq 0.7$$

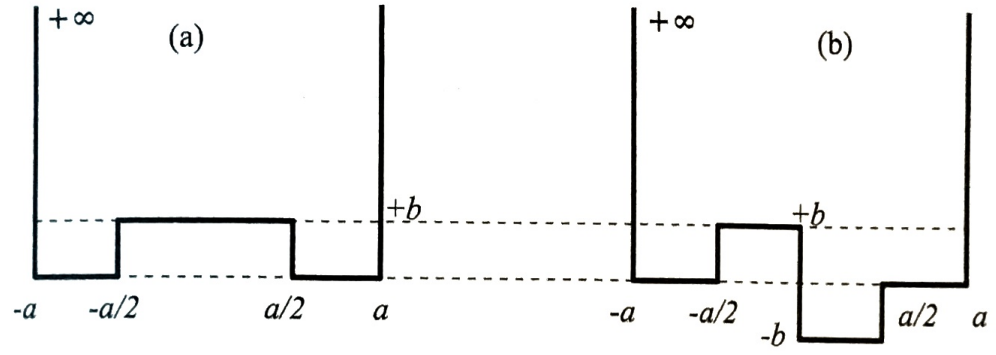
PROBLEMLER

7.1 *$[0,L]$ aralığındaki sonsuz kuyuda bir parçacığa aşağıdaki pertürbasyonlar etki ediyor:*

(a) $V(x) = \varepsilon\,(x/L)^2$

(b) $V(x) = \varepsilon\,\sin(3\pi x/L)$

Taban durumu enerjisine 1. dereceden yaklaşık çözümleri bulun.



Şekil 7.5: Problem 7.2

7.2 *Şekil 7.5a ve 7.5b de gösterilen sonsuz kuyu potansiyeli tabanındaki çıkıntıların taban durumu ($n = 1$) ve 1. uyarılmış durum ($n = 2$) enerji özdeğerlerine 1. dereceden katkısını hesaplayın.*

7.3 *$[0,a]$ aralığında sonsuz kuyu potansiyelindeki bir parçacığa*

$$V(x) = V_0 \sin\frac{\pi x}{a}$$

pertürbasyon potansiyeli etkiyor. V_0 değerinin küçük olduğunu varsayarak, en düşük enerjili iki özdurumun enerjilerindeki değişikliği 1. dereceden hesaplayın.

7.4 *Hidrojen atomu taban durumunda, Stark olayı nedeniyle meydana gelen enerji değişikliğini 1. dereceden pertürbasyon olarak hesaplayın (Not: Etkileşme terimi yine $V = e\mathscr{E}z = e\mathscr{E}\, r\cos\theta$ olur).*

7.5 *$[0,L]$ aralığındaki sonsuz kuyuda bir parçacığa*

$$V(x) = \frac{\varepsilon}{L}\,(x - L/2)$$

pertürbasyon terimi etki ediyor. Taban durumu enerjisine 1. dereceden katkının sıfır olduğunu gösterin ve 2. dereceden katkıyı hesaplayın.

7.6

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + e\mathscr{E}\,x$$

anharmonik salınıcı problemi metinde 2. derece pertürbasyon problemi olarak çözülmüştü. Aslında bu problemin tam çözümü vardır (x^2 ve x li terimlerden bir tam kare oluşturup değişken değiştirilir). Bu hamiltonyenin taban durumu enerjisini tam olarak hesaplayıp metinde verilen yaklaşık çözümle karşılaştırın.

7.7 *İki boyutlu harmonik salınıcının 3 kez katlı olan $n = 2$ durumunda*

$$V(x,y) = Kxy$$

pertürbasyonu etki ediyor. Enerji düzeylerinin nasıl ayrışacağını hesaplayın.

7.8 *Hidrojen atomunun $n = 3$ düzeyinde Stark olayını inceleyin (Not: Burada hesaplanacak olan 9×9 matrisin sadece birkaç elemanı sıfırdan farklı olacaktır).*

7.9 *Harmonik salınıcı taban durumunu*

$$\psi(x) = \begin{cases} (a^2 - x^2) & -a < x < a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$

deneme fonksiyonuyla temsil ederek, taban durumu enerjisinin

$$E = \sqrt{\frac{5}{14}}\,\hbar\omega \approx 0.598\,\hbar\omega$$

olacağını gösterin.

7.10 *Hidrojen atomu taban durumu için*

$$\psi = \mathrm{e}^{-br^2}$$

deneme fonkiyonu kullanarak taban durumu enerjisini bulun.

7.11 *Bir sonsuz kuyu potansiyelinde n kuantum sayılı özdurumdaki bir parçacığa*

$$V(t) = V_0 x\cos\omega t$$

pertürbasyonu etkiyor. Başka bir n' özdurumuna geçiş olabilmesi için $n + n'$ değerinin tek olması gerektiğini gösterin.

7.12 *Tek boyutlu harmonik salınıcı* $e\mathcal{E}_0 x \cos \omega t$ *gibi harmonik bir elektrik alana konuluyor. Elektrik dipol geçişi olabilmesi için* $\Delta n = n' - n = \pm 1$ *olması gerektiğini gösterin. (Not: tekrarlama bağıntısı kullanarak* xH *terimini indirgeyin).*

7.13 *Taban durumundaki bir harmonik salınıcının yay sabiti*

$$k(t) = m\omega(t)^2 = m\omega_0^2 e^{-\lambda t}$$

şeklinde yavaşça azalıyor ($\lambda \ll 1$). *Salınıcı enerjisinin zamana göre değişimini bulun.*

7.14 *Taban durumundaki bir harmonik salınıcının yay sabiti* ($k = m\omega^2$) *aniden yarı değerine düşüyor. Salınıcının yine taban durumunda bulunma olasılığının 0.98 olduğunu gösterin.*

7.15 *Bir parçacık* L_0 *genişliğindeki bir sonsuz kuyu potansiyelinin 2. uyarılmış durumundayken* ($n = 3$), *kuyu genişliği aniden iki katına çıkarılıyor. (a) Parçacığın aynı uyarılmış durumda kalma olasılığını, (b) taban durumuna geçiş olasılığını hesaplayın.*

BÖLÜM 8

AÇISAL MOMENTUM VE SPİN

Buraya kadarki bölümlerde kullanılan tüm fiziksel büyüklükler uzay koordinatları $\vec{r}$ veya $\vec{p}$ cinsinden yazılabiliyordu ve incelenen parçacığın dinamik durumu, bir $\vec{r}$ konumlu yerdeki dalga fonksiyonu $\psi(\vec{r})$ verilmekle tamamen belirlenmiş oluyordu. Başka bir deyişle, parçacığın bir iç serbestlik derecesi yoktu. Ancak, deneysel gözlemler sonucu, klasik karşılığı olmayan bir "iç açısal momentum" (spin) olduğu ortaya konunca bunun kuantum teorisine tekrar eğilmek gerekti. Yörünge açısal momentumunu da kapsayan bu genel teorinin ana hatlarını ve basit uygulamalarını bu bölümde inceleyelim.

8.1 AÇISAL MOMENTUM CEBİRİ

3 boyutlu problemleri incelerken yörünge açısal momentumu $\vec{L}$ nin kutupsal koordinatlardaki temsilinden yola çıkarak L^2 ve L_z operatörlerinin ortak özvektör ve özdeğerlerini bulmuştuk. $Y_l^m(\theta,\phi)$ küresel harmoniklerini $|l\ m\rangle$ ket vektörüyle gösterirsek

$$\begin{aligned} L^2|l\ m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|l\ m\rangle \\ L_z|l\ m\rangle &= \hbar m|l\ m\rangle \end{aligned}$$

olduğu ve l kuantum sayısının tamsayılar olması gerektiği bulunmuştu.

Burada tamamen başka bir yol izleyelim. Açısal momentum vektörünün bileşenleri arasındaki sıra değiştirme bağıntılarını yazalım:

$$[L_x,L_y] = i\hbar L_z, \qquad [L_y,L_z] = i\hbar L_x, \qquad [L_z,L_x] = i\hbar L_y$$

Bu sıra değiştirme bağıntıları tamamen cebirsel bağıntılar olup, yörünge açısal momentumunun $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ tanımından daha genel bağıntılardır. O halde, bu sıra değiştirme bağıntılarını esas alıp, genel bir $\vec{J}$ açısal momentum operatörünü

$$[J_x,J_y] = i\hbar J_z, \qquad [J_y,J_z] = i\hbar J_x, \qquad [J_z,J_x] = i\hbar J_y \tag{8.1}$$

bağıntılarıyla tanımlayalım ve bu cebire ait genel özellikleri arayalım. Görüleceği gibi, yörünge açısal momentumuna ek olarak, yarım tam sayılı özdeğerlere sahip açısal momentum vektörleri de bulunacaktır.

8.1.1 ÖZDEĞER SPEKTRUMU

Önce, $\vec{J}$ nin bileşenleri yardımıyla iki yeni *basamak operatörleri* tanımlayalım:

$$\begin{aligned} J_+ &= J_x + iJ_y \\ J_- &= J_x - iJ_y \end{aligned} \tag{8.2}$$

Basamak operatörlerinin hermitik olmadığına, ama bir diğerinin hermitik eşleniği olduğuna dikkat edelim:

$$J_+^\dagger = J_- \qquad\qquad J_-^\dagger = J_+$$

Denklem 8.1 deki sıra değiştirme bağıntıları kullanılarak basamak operatörlerinin sıra değiştirme özellikleri bulunur:

$$\begin{aligned} [J_z, J_+] &= \hbar J_+ \\ [J_z, J_-] &= -\hbar J_- \\ [J_+, J_-] &= 2\hbar J_z \\ [J^2, J_+] &= [J^2, J_-] = 0 \end{aligned} \tag{8.3}$$

Ayrıca ($J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$) operatörünün, bu basamak operatörleri cinsinden

$$\begin{aligned} J^2 &= J_- J_+ + J_z^2 + \hbar J_z \\ &= J_+ J_- + J_z^2 - \hbar J_z \end{aligned} \tag{8.4}$$

şeklinde yazılacağı kontrol edilebilir.

Bu özellikler, J^2 ve J_z operatörlerinin özdeğer spektrumunu bulmaya yeterlidirler.

$[J^2, J_z] = 0$ olduğundan, bu iki operatör ortak özvektörlere sahiptirler. Bu normlanmış özvektörleri, $|\lambda\ m\rangle$ olarak gösterirsek

$$\begin{aligned} J^2|\lambda\ m\rangle &= \lambda\hbar^2|\lambda\ m\rangle \\ J_z|\lambda\ m\rangle &= m\hbar|\lambda\ m\rangle \end{aligned}$$

olur. Burada, J^2 nin özdeğeri λ, J_z nin özdeğeri de m dir. ($\hbar^2$ ve $\hbar$ kullanarak λ ve m nin boyutsuz olması sağlandı.) Bu aşamada λ ve m nin tamsayı olup olmadığı konusunda bir şey söylenemez.

Bir $|\lambda\ m\rangle$ özdurumunda bu J^2 operatörünün beklenen değerleri hesaplanırsa

$$\begin{aligned} \langle J^2\rangle &= \langle J_x^2\rangle + \langle J_y^2\rangle + \langle J_z^2\rangle \\ \lambda\hbar^2 &= \langle J_x^2\rangle + \langle J_y^2\rangle + m^2\hbar^2 \end{aligned}$$

bulunur.

J_x ve J_y hermitik operatörler olduğundan, $\langle J_x^2 \rangle$ ve $\langle J_y^2 \rangle$ beklenen değerleri pozitif sayılardır (problem 8.1). Buradan

$$m^2 \leq \lambda$$

eşitsizliği ortaya çıkar. Bu sonuca göre, J_z operatörünün m özdeğerinin bir alt ($m_{\min}$) ve bir de üst limiti ($m_{\max}$) olmalıdır:

$$m_{\max} \leq \sqrt{\lambda} \qquad \text{ve} \qquad m_{\min} \geq -\sqrt{\lambda}$$

Bir $|\lambda\ m\rangle$ özvektörüne $J_z J_+$ operatörünün etkisini hesaplayalım. Yukardaki $[J_z, J_+]$ bağıntısı kullanılırsa:

$$\begin{aligned} J_z J_+ |\lambda\ m\rangle &= (J_+ J_z + \hbar J_+) |\lambda\ m\rangle \\ &= J_+ (J_z |\lambda\ m\rangle) + \hbar J_+ |\lambda\ m\rangle \\ &= m\hbar J_+ |\lambda\ m\rangle + \hbar J_+ |\lambda\ m\rangle \end{aligned}$$

ve

$$J_z (J_+ |\lambda\ m\rangle) = (m+1)\hbar\ (J_+ |\lambda\ m\rangle)$$

olur. Bu ifadeye bir özdeğer denklemi gözüyle bakıldığında $J_+ |\lambda\ m\rangle$ nin, J_z operatörünün $(m+1)\hbar$ özdeğerine karşılık gelen bir özvektörü olduğu anlaşılmaktadır. O halde

$$J_+ |\lambda\ m\rangle = |\lambda\ m+1\rangle$$

yazılabilir (burada bir de normlama sabiti gerekirdi; şimdilik bunu gözönüne almıyoruz).

Bu ifadeye bir kez daha J_+ operatörüyle etki edersek

$$J_+ (J_+ |\lambda\ m\rangle) = J_+ |\lambda\ m+1\rangle = |\lambda\ m+2\rangle$$

olacağı görülür.

Benzer şekilde, J_- basamak operatörünün etkisinin

$$\begin{aligned} J_- |\lambda\ m\rangle &= |\lambda\ m-1\rangle \\ J_-^2 |\lambda\ m\rangle &= |\lambda\ m-2\rangle \end{aligned}$$

olacağı kolayca gösterilebilir. Buradan çıkan sonuç şudur: basamak operatörleri $J_\pm$ yardımıyla, J_z operatörünün m özdeğerlerinin

$$\ldots, m-2, m-1, m, m+1, m+2, \ldots,$$

şeklinde, birer farklı ardışık özdeğerleri ve özvektörleri türetilebilir.

Ancak, m özdeğerinin $m_{\max}$ gibi bir maksimum değeri olduğunu görmüştük. Bu maksimum özdeğerli vektöre bir kez daha J_+ ile etki ettiğimizde

$$J_+ |\lambda\ m_{\max}\rangle = 0$$

olmak zorundadır. Şimdi, aynı özvektöre J^2 operatörüyle etki edelim:

$$J^2 |\lambda\ m_{\max}\rangle = \lambda\hbar^2 |\lambda\ m_{\max}\rangle$$

Yukarda bulunan $J^2 = J_-J_+ + J_z^2 + \hbar J_z$ ifadesi kullanılırsa

$$\begin{aligned}(J_-J_+ + J_z^2 + \hbar J_z)|\lambda\ m_{\max}\rangle &= \lambda\hbar^2|\lambda\ m_{\max}\rangle \\ J_-(J_+|\lambda\ m_{\max}\rangle) + J_z^2|\lambda\ m_{\max}\rangle + \hbar J_z|\lambda\ m_{\max}\rangle &= \lambda\hbar^2|\lambda\ m_{\max}\rangle \\ 0 + m_{\max}^2\hbar^2|\lambda\ m_{\max}\rangle + \hbar^2 m_{\max}|\lambda\ m_{\max}\rangle &= \lambda\hbar^2|\lambda\ m_{\max}\rangle\end{aligned}$$

olur. Buradan özdeğerler arasında şu bağıntı elde edilir:

$$m_{\max}^2 + m_{\max} = \lambda$$

Benzer şekilde, J_- operatörü kullanarak $m_{\min}$ için şöyle bir bağıntı bulunur:

$$m_{\min}^2 - m_{\min} = \lambda$$

Bu son iki bağıntı arasından λ elenirse

$$m_{\max}^2 + m_{\max} = m_{\min}^2 - m_{\min}$$

Bu 2. derece denklemin çözümü

$$m_{\min} = -m_{\max}$$

olur (diğer çözüm $m_{\min} = m_{\max} + 1$ olup anlamsızdır). O halde, m özdeğerinin alt ve üst limiti aynı sayının zıt işaretlisi olurlar. Bu maksimum değere $m_{\max} \equiv j$ dersek, *m sayısı $-j$ değerinden $+j$ değerine kadar birim aralıklarla yer almaktadır.*

Bu özellik nasıl sağlanabilir? Örneğin, $j = +5.7$ özdeğeri olabilseydi, bunu her defasında birer eksilterek $j = -5.3$ değerine varılabilirdi, yani -5.7 değerine geçilemezdi.

Bu özellik ancak iki farklı şekilde sağlanabilir:

(a) *j bir tamsayı olabilir*:

$$j = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Bu durumda, m özdeğeri

$$m = -j, -j+1, \ldots, -1, 0, 1, \ldots, j-1, j$$

şeklinde $2j+1$ farklı değer alabilir.

(b) *j yarım tamsayı olabilir*:

$$j = \tfrac{1}{2},\ \tfrac{3}{2},\ \tfrac{5}{2},\ \ldots$$

Bu durumda, m özdeğeri

$$m = -j, -j+1, \ldots, -\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}, \ldots, j-1, j$$

şeklinde $2j+1$ farklı değer alabilir. Bu durumda, $m = 0$ değerinin yer almadığına dikkat edelim.

Her iki durum için, λ özdeğeri ($\lambda = m_{\max}^2 + m_{\max}$) yazılırsa

$$\lambda = j(j+1)$$

olur ve sonuç olarak, j özdeğerinin alabileceği değerler, tamsayı veya yarım tamsayı olabilir:

$$j = 0,\ \tfrac{1}{2},\ 1,\ \tfrac{3}{2},\ 2,\ \ldots$$

Görüldüğü gibi genel teori, açısal momentumun yarım tamsayı olabildiği durumları otomatik olarak verebilmektedir. Yörünge açısal momentumunun tamsayılı özdeğerlere sahip olduğunu görmüştük. Açısal momentumun yarım tamsayılı özdeğerlere sahip olabileceği duruma fiziksel bir anlam kazandırabilir miyiz?

8.1.2 J OPERATÖRLERİNİN MATRİS TEMSİLİ

J^2 ve J_z operatörleri sıra değiştirdiği için ortak baz vektörleri kümesine sahiptirler. Bu baz vektörlerini Dirac notasyonunda $|j\ m\rangle$ ile gösterirsek, herhangi bir $\hat{A}$ operatörünün bu bazdaki temsili $\langle j'm'|\hat{A}|jm\rangle$ matrisi olacaktır.

$|j\ m\rangle$ baz vektörleri için sütun vektörleri temsili seçmeye çalışalım. $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$ şeklinde sonsuz değerler alabildiği için, $\{|j\ m\rangle\}$ vektörleri sonsuz boyutlu bir uzay oluştururlar. O halde, kullanılacak sütun vektörlerinin satır sayısının sonsuz olması gerekir.

Burada konuyu basitleştirmek için, verilen bir j özdeğerine ait $2j+1$ sayıdaki $|j\ m\rangle$ vektörlerinin oluşturduğu $2j+1$ boyutlu alt uzayda çalışalım. Buna göre, $|j\ m\rangle$ baz vektörlerini sütun vektörleri olarak şöyle sıralayabiliriz (j tamsayı varsayalım):

$$|j\ j\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |j\ j-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |j\ j-2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \ldots \quad |j\ -j\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

Toplam baz vektörü sayısı $2j+1$ olur ve herbir vektörün $2j+1$ satırı vardır.

Şimdi, bu bazda J^2, J_x, J_y, J_z nin matris temsillerini arayalım.

J^2 ve J_z operatörleri köşegen matrisler olacaklardır:

$$\begin{aligned} \langle j\ m'|J^2|j\ m\rangle &= j(j+1)\hbar^2\ \delta_{mm'} \\ \langle j\ m'|J_z|j\ m\rangle &= m\hbar\ \delta_{mm'} \end{aligned}$$

J_x ve J_y nin matris temsilini bulmak için basamak operatörlerinin etkisine bakalım:

$$J_+|j\ m\rangle = c_+|j\ m+1\rangle$$

olduğunu görmüştük. Burada normlama katsayısı c_+ değerini arayalım.

$J_- = (J_+)^\dagger$ olduğundan, yukardaki eşitliğin hermitik eşleniği

$$\langle j\ m|J_- = \langle j\ m+1|c_+^*$$

olur. Buradan

$$\langle j\ m|J_-J_+|j\ m\rangle = |c_+|^2\ \langle j\ m+1|j\ m+1\rangle = |c_+|^2$$

yazılabilir. $J_-J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$ olduğundan

$$|c_+|^2 = \langle j\, m+1|(J^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|j\, m+1\rangle = [j(j+1) - m^2 - m]\hbar^2$$

bulunur. Bu bağıntı, c_+ katsayısının sadece mutlak değer karesini belirler. c_+ nin kendisi belirlemek imkansızdır. Fizikte en çok kabul edilen bir standarda göre pozitif karekök alınırsa, J_+ nin etkisi şöyle yazılabilir:

$$J_+|j\, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\hbar\, |j\, m+1\rangle \tag{8.5}$$

Benzer şekilde, J_- operatörünün etkisi bulunur:

$$J_-|j\, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\hbar\, |j\, m-1\rangle \tag{8.6}$$

Şimdi, J_x ve J_y operatörlerini basamak operatörleri cinsinden yazalım:

$$J_x = \frac{1}{2}(J_- + J_+), \qquad J_y = \frac{i}{2}(J_- - J_+)$$

olur. Bu durumda, J_x ve J_y nin matris elemanları

$$\begin{aligned}
\langle j\, m'|J_x|j\, m\rangle &= \frac{1}{2}\left[\langle j\, m'|J_-|j\, m\rangle + \langle j\, m'|J_+|j\, m\rangle\right] \\
&= \frac{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\hbar}{2}\,\delta_{m',m-1} + \frac{\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\hbar}{2}\,\delta_{m',m+1} \\
\langle j\, m'|J_y|j\, m\rangle &= \frac{i}{2}\left[\langle j\, m'|J_-|j\, m\rangle - \langle j\, m'|J_+|j\, m\rangle\right] \\
&= \frac{i\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\hbar}{2}\,\delta_{m',m-1} - \frac{i\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\hbar}{2}\,\delta_{m',m+1}
\end{aligned}$$

olur. Bir örnek olmak üzere, $j = 1$ için bu matrisleri açık yazalım

$$J^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad J_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

Daha sonra, spin kısmında kullanmak üzere, $j = \frac{1}{2}$ için baz vektörlerini ve operatörlerin matris temsillerini de yazalım:

$$|\tfrac{1}{2}\, +\tfrac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |\tfrac{1}{2}\, -\tfrac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$j = 1/2$ için $\vec{S}$ ile gösterilen açısal momentum vektörü şöyle temsil edilir:

$$S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad S_z = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$S_x = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_y = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

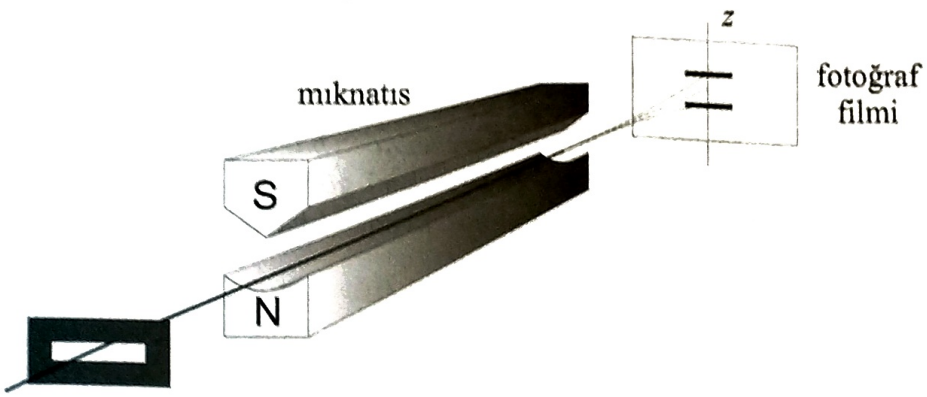
8.2 SPİN

Kitabın bu kısmına kadar parçacıkları noktasal birer kütle olarak ele aldık ve bir iç yapıları olmadığını varsaydık. Başka bir deyişle, parçacığın durumunu veren dalga fonksiyonu sadece $\vec{r}$ konumunun bir fonksiyonu idi.

Ancak, atomların bir magnetik alanda davranışları incelendiğinde bu bakış açısı çelişki yaratır. 1922 yılında Stern-Gerlach deneyi sonucu, parçacıkların bir iç yapısı olduğu ortaya çıktı. Daha sonra, bu iç yapının bir çeşit açısal momentum olması gerektiği anlaşıldı. Ancak, klasik bir açıklama (yani, parçacığın bir topaç gibi, veya gezegenlerin kendi etrafındaki dönüşü gibi açıklamalar) rölativite teorisine göre imkansız olmaktadır. Doğru yorum, 1925 yılında Uhlenbeck ve Goudsmit adlı fizikçiler tarafından ortaya konuldu.

Stern-Gerlach Deneyi

Bu deneyde, bir kaynaktan çıkan eşit enerjili gümüş atomları demeti düzgün olmayan bir $\vec{B}$ magnetik alanı içine gönderilir. Magnetik alanda sapmaya uğrayan demet daha sonra ekran üzerinde tesbit edilir (Şek. 8.1).



Şekil 8.1: Stern-Gerlach deneyi.

Nötr bir parçacık bir magnetik alanda sapmaya uğruyorsa $\vec{\mu}$ ile gösterilen bir magnetik momente sahip olmalıdır. Klasik elektromagnetiğe göre, bu dipole etkiyen kuvvet

$$\vec{F} = \vec{\nabla}\left(\vec{\mu}.\vec{B}\right)$$

olur. Kolaylık açısından, magnetik alanı z-doğrultusunda alınırsa $\vec{\mu}.\vec{B} = \mu_z B$ olur ve

$$\vec{F} = \mu_z \vec{\nabla} B$$

yazılabilir.

Klasik teoriye göre magnetik moment, ancak yüklü parçacıkların hareketinden oluşur. Bu örnekte, elektronların çekirdek etrafındaki hareketinden dolayı bir $\vec{L}$ yörünge açısal momentumu oluşur ve buna bağlı olarak da magnetik moment ifadesi

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2m_e c}\vec{L}$$

olur. Elektronlar için ($q = -e$) olduğundan $\vec{\mu}$ ve $\vec{L}$ vektörleri antiparalel olurlar.

Bu klasik açıklamanın kuantum mekaniğinde de doğru olduğunu kabul edersek, magnetik momentin z-bileşeni, açısal momentumun z-bileşeni gibi kuantalanmalıdır, yani

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_e c} L_z = -\frac{e\hbar}{2m_e c} m = -\mu_B\, m$$

burada m magnetik kuantum sayısı ve sabit faktör (μ_B) *Bohr magnetonu* olur. Bu sonuca göre, en küçük magnetik moment birimi μ_B olmalıdır.

O halde, m nin değerine göre, ekranda sürekli bir iz yerine, $2l+1$ tane farklı kola ayrışan izler görülmesini bekleriz. l tamsayı olduğundan, izlerin toplam sayısı tek sayı olmalıdır. Oysa, deneysel sonuç şöyledir:

(a) Ekranda sadece iki iz görülür,

(b) Magnetik momentin en küçük değeri $\mu = 2\mu_B$ olur.

Yörüngede dönen elektronlara dayalı hiçbir yorum bu sonucu açıklayamaz. Ayrıca, kendi etrafında topaç gibi dönen bir elektron yorumu da, bu açısal momentumu verebilmesi için elektronun ışık hızından yüksek hızlarda dönmesini gerektirir ve kabul edilemez.

Bu aşamada, Uhlenbeck ve Goudsmit tarafından ortaya atılan spin hipotezi kuantum mekaniğinde bir postüla olarak alınır:

- *Her elemanter parçacığın, yörünge hareketinden bağımsız olarak, bir iç açısal momentumu (spin) vardır. Bu dinamik değişkeni gösteren* $\vec{S} : (S_x, S_y, S_z)$ *operatörü, uzay değişkenleri* $\vec{r}$, $\vec{p}$ *cinsinden tanımlanamaz ve bu değişkenlerle sıra değiştirme özelliğine sahiptir. Özel olarak,*

$$[\vec{L}, \vec{S}] = 0$$

olur.

- *Bir parçacığın toplam açısal momentumu*

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

ile belirlenir.

- *Parçacığın yörünge açısal momentumu* ($l = 0, 1, 2, \ldots$) *gibi keyfi her* $l\hbar$ *değerini alabildiği halde, spin açısal momentumu o cins parçacıklar için sabit bir değere sahiptir. Örneğin,*

  - *Elektron, proton, nötron, nötrino,* μ*-mezon,... gibi parçacıklar için* $S = \frac{1}{2}\hbar$ *olur.*
  - π*, K gibi mezon denilen parçacıklar için* $S = 0$ *olur.*

  Spin açısal momentumunun z-bileşeni S_z *nin özdeğerlerine* m_s *dersek,* m_s *değeri* $-S, \ldots, +S$ *arasında değişen değerler alabilir.* Örneğin, elektron için $S = \frac{1}{2}$ olduğundan, $m_s = -\frac{1}{2}$ ve $m_s = \frac{1}{2}$ olmak üzere sadece iki değer alabilir.

8.2.1 1/2 SPİNLİ PARÇACIKLAR

Elektron, proton ve nötronlar yarım spine sahiptirler. Uygulamadaki önemi bakımından yarım spinli durumu ayrıntılı olarak inceleyelim. $j = \frac{1}{2}$ olduğunda toplam açısal momentum vektörü $\vec{J} = \vec{S}$ ile gösterilir. Bu durumda, $j = s = \frac{1}{2}$ ve $m = m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$ olur.

Baz vektörlerinin sütun vektörü olarak temsilleri daha önce bulunmuştu. S_z bileşeninin $+\frac{1}{2}$ olduğu özdurumu α ile, $-\frac{1}{2}$ olduğu durumu da β ile göstermek standard olmuştur. Buna göre baz vektörleri

$$|\uparrow\rangle = |\tfrac{1}{2}\,+\tfrac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \alpha \qquad |\downarrow\rangle = |\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \beta$$

olarak birçok farklı şekilde yazılabilirler.

Spin operatörlerinin bu vektörlere etkisinin

$$\begin{aligned} S^2\alpha &= \frac{3}{4}\hbar^2\,\alpha\,, & S_z\alpha &= \frac{\hbar}{2}\alpha \\ S^2\beta &= \frac{3}{4}\hbar^2\,\beta\,, & S_z\beta &= -\frac{\hbar}{2}\beta \end{aligned}$$

olduğu açıktır. Baz vektörlerinin ortonormal olduğu da kontrol edilebilir:

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\beta\rangle &= \langle\beta|\alpha\rangle = 0 \\ \langle\alpha|\alpha\rangle &= \langle\beta|\beta\rangle = 1 \end{aligned}$$

S^2, S_x, S_y, S_z operatörlerinin matris temsilleri daha önce yazılmıştı. Bu temsillerden daha kullanışlı olan *Pauli spin matrisleri*ni burada tanımlayalım:

$$\vec{\sigma} = \frac{2}{\hbar}\,\vec{S} \tag{8.7}$$

$\vec{S}$ nin bileşenleri için bulduğumuz ifadeler burada kullanılırsa, Pauli spin matrislerinin temsilleri

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{8.8}$$

olur.

Pauli spin matrislerinin bazı özellikleri şöyle sıralanabilir (bu ifadelerdeki çarpımların matrisler arasında olduğunu unutmamak gerekir):

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 &= \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \qquad \text{(bu 1 gerçekte 2 boyutlu birim matris } \mathbb{I} \text{ dir.)} \\ \sigma^2 &= 3 \\ \sigma_x\sigma_y &= -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z \\ \sigma_y\sigma_z &= -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x \\ \sigma_z\sigma_x &= -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y \\ \sigma_x\sigma_y\sigma_z &= i \end{aligned}$$

Bir A matrisinin köşegen üzerindeki elemanlarının toplamına matrisin *izi* (trace) denir ve TrA ile gösterilir:

$$\mathrm{Tr}\, A = A_{11} + A_{22} + \cdots = \sum_i A_{ii}$$

Pauli spin matrisleri için

$$\mathrm{Tr}\, \sigma_x = \mathrm{Tr}\, \sigma_y = \mathrm{Tr}\, \sigma_z = 0 \tag{8.9}$$

olur.

Spin $\frac{1}{2}$ uzayında her M matrisi Pauli spin matrislerinin bir lineer kombinasyonu olarak yazılabilir. Bu M matrisini

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}$$

olarak yazarsak

$$M = a\sigma_x + b\sigma_y + c\sigma_z + d\,\mathbb{I}$$

eşitliğini veren a, b, c, d katsayılarını bulmamız gerekir. Burada $\mathbb{I}$ birim matristir. Matrisleri açık yazıp hesaplayalım:

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} = a\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + b\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + c\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + d\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} c+d & a-ib \\ a+ib & d-c \end{pmatrix}$$

Bu iki matrisin herbir elemanı eşitlenirse, 4 bilinmeyenli 4 denklem elde edilir ve çözümler bulunabilir.

Katsayıları pratik olarak bulmanın daha kolay bir yolu vardır: Pauli spin matrislerinin izleri sıfır olduğu için yukardaki matris eşitliğin izi alınırsa

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}M &= a\,\mathrm{Tr}\,\sigma_x + b\,\mathrm{Tr}\,\sigma_y + c\,\mathrm{Tr}\,\sigma_z + d\,\mathrm{Tr}\,\mathbb{I} \\ m_{11} + m_{22} &= 2d \end{aligned}$$

olur, yani d katsayısı M nin köşegen elemanları toplamının yarısına eşittir. Öte yandan, $\sigma_i^2 = 1$ özelliğini kullanmak üzere yine matris eşitliğin iki tarafı σ_x ile çarpılıp iz alınırsa

$$\begin{aligned} \sigma_x M &= a\sigma_x^2 + b\sigma_x\sigma_y + c\sigma_x\sigma_z + d\sigma_x \\ &= a\mathbb{I} + ib\sigma_z - ic\sigma_y + d\sigma_x \\ \mathrm{Tr}\,\sigma_x M &= a\times 2 + 0 + 0 + 0 = 2a \end{aligned}$$

Benzer şekilde b, c katsayıları bulunur.

Alıştırma 8.1 : S_+ operatörünün spin z-bileşenini bir artırdığını gösterin.

Çözüm : Basamak operatörü S_+ Pauli spin matrisleri cinsinden yazılırsa

$$S_+ = S_x + iS_y = \frac{\hbar}{2}[\sigma_x + i\sigma_y]$$

olur. Bu operatörün α ve β baz vektörlerine etkisi

$$\begin{aligned} S_+\alpha &= S_+|\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2}\rangle = \tfrac{\hbar}{2}[\sigma_x+i\sigma_y]\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2}\left\{\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+i\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right\} \\ &= \frac{\hbar}{2}\left\{\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0\\-1\end{pmatrix}\right\}=0 \\ S_+\beta &= S_+|\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\rangle = \tfrac{\hbar}{2}\left\{\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}+i\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right\} \\ &= \frac{\hbar}{2}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right\}=\hbar\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\hbar\,\alpha \end{aligned}$$

Alıştırma 8.2: Bir A matrisi

$$A=\begin{pmatrix}2&1\\-3&0\end{pmatrix}$$

olarak veriliyor. Bunu Pauli spin matrisleri cinsinden yazın.

Çözüm:

$$A=a\sigma_x+b\sigma_y+c\sigma_z+d\,\mathbb{I}$$

yazılırsa, yukarda gösterilen iz alma tekniğiyle katsayılar kolayca bulunabilir. Önce $\sigma_i A$ matris çarpımlarını bulalım:

$$\begin{aligned} \sigma_x A &= \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1\\-3&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-3&0\\2&1\end{pmatrix} \\ \sigma_y A &= \begin{pmatrix}2&1\\-3&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1\\-3&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3i&0\\2i&i\end{pmatrix} \\ \sigma_z A &= \begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1\\-3&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&1\\3&0\end{pmatrix} \end{aligned}$$

Bu ifadelerin izleri alınırsa

$$\begin{aligned} d &= \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\,A=\frac{2+0}{2}=1 \\ a &= \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\,\sigma_x A=\frac{-3+1}{2}=-1 \\ b &= \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\,\sigma_y A=2i \\ c &= \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\,\sigma_z A=1 \end{aligned}$$

bulunur. O halde, A matrisinin ifadesi

$$A=-\sigma_x+2i\sigma_y+\sigma_z+\mathbb{I} \quad \text{olur}$$

Alıştırma 8.3: *S_x operatörünün $\{\alpha, \beta\}$ bazında özdeğer ve özvektörlerini bulun.*

Çözüm: $s = \frac{1}{2}$ olduğu için özdeğerlerin $\pm\frac{1}{2}$ olduğu açıktır. Spin uzayında bu özdeğer problemi iki bileşenli olarak yazılırsa

$$S_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda\hbar \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

olur. $S_x = (\hbar/2)\sigma_x$ olduğundan

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda\hbar \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Buradan iki denklem elde edilir ve λ parametresi elenirse

$$b/2 = \lambda a \qquad a/2 = \lambda b \qquad a^2 = b^2$$

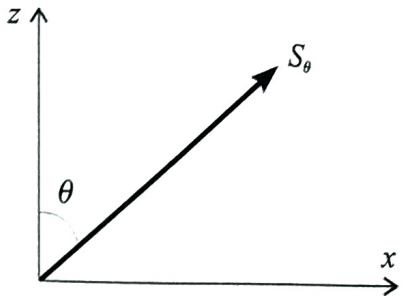
bulunur. İki çözüm $b = \pm a$ olur. a sabiti de normlama koşuluyla belirlenir:

$$a^2 + b^2 = 1 \qquad |a| = |b| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Sonuç olarak, S_x operatörünün özvektörleri yazılır:

$$|u_{+x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad |u_{-x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Alıştırma 8.4: *z-ekseni yönündeki spin bileşeni $+1/2$ olan bir elektron, xz- düzleminde ve z-ekseniyle θ açısı yapan bir doğrultuda spin bileşeni ölçebilen bir Stern-Gerlach aygıtına gönderiliyor. Ölçme sonucu bu yeni doğrultudaki spin bileşeninin $+\hbar/2$ ve $-\hbar/2$ bulunma olasılığını hesaplayın.*



Şekil 8.2: S_θ spin bileşeni.

Çözüm: xz- düzleminde ve θ doğrultusundaki spin operatörü S_θ ile gösterilirse, yapılması gereken ilk iş, bir önceki alıştırmada olduğu gibi, bu operatörün özvektörlerini bulmaktır.

Bu S_θ operatörü S_x ve S_z bileşenleri cinsinden

$$S_\theta = S_x \sin\theta + S_z \cos\theta$$

olarak yazılabilir (Şekil 8.2). Pauli spin matrisleri kullanıldığında S_θ nın temsili

$$S_\theta = \frac{\hbar}{2}\left\{\sin\theta\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} + \cos\theta\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\right\}$$
$$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ \sin\theta & -\cos\theta\end{pmatrix}$$

olur. Bu matrisin de özdeğerlerinin $\pm 1/2$ olduğu kolayca gösterilebilir. $+1/2$ değerine karşılık gelen özvektörü bulmak için denklemde doğrudan $\lambda = +\hbar/2$ kullanılırsa

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ \sin\theta & -\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = +\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$$
$$a\cos\theta + b\sin\theta = a$$
$$b = \frac{1-\cos\theta}{\sin\theta}a = \frac{\sin\frac{\theta}{2}}{\cos\frac{\theta}{2}}a$$

bulunur. Böylece, normlanmış özvektörler ($-1/2$ için de benzer şekilde) yazılabilir:

$$|u_{+\theta}\rangle = \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} \qquad |u_{-\theta}\rangle = \begin{pmatrix}-\sin\frac{\theta}{2}\\ \cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

Elektron aygıta girdiğinde spin durumu $\alpha = |\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\rangle$ dir. O halde, yapılacak iş, bu ilk durumu θ doğrultusundaki özvektörlerin süperpozisyonu olarak yazmaktır:

$$\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} = c_+\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} + c_-\begin{pmatrix}-\sin\frac{\theta}{2}\\ \cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

Buradaki c katsayılarının mutlak değer karesi aranan olasılıkları verecektir.

İşlemler sonucu katsayılar

$$c_+ = \cos\frac{\theta}{2} \qquad c_- = -\sin\frac{\theta}{2}$$

ve mutlak değer kareleri

$$|c_+|^2 = \cos^2\frac{\theta}{2} \qquad |c_-|^2 = \sin^2\frac{\theta}{2}$$

olarak bulunur. O halde, z yönünde spin bileşeni $+\frac{1}{2}$ olarak gelen bir elektronun yeni bir θ doğrultusunda $+\frac{1}{2}$ spinle ölçmenin olasılığı $\cos^2\frac{\theta}{2}$, $-\frac{1}{2}$ spinle bulmanın olasılığı da $\sin^2\frac{\theta}{2}$ olur.

Bir tür sağlama olması amacıyla $\theta = 0$ ve $\theta = \pi$ (yani, $\pm z$ yönlerinde) bulma olasılıklarının sırasıyla 1 ve 0 olacağı görülebilir.

8.3 İKİ AÇISAL MOMENTUMUN TOPLAMI

Bir sistemde iki farklı serbestlik derecesine karşılık gelen açısal momentumların toplanması kuantum mekaniğinin en önemli problemlerinden biridir. Bu iki serbestlik derecesi aynı parçacığa ait olabilir (örneğin, hidrojen atomundaki elektronun yörünge açısal momentumu $\vec{L}$ ile spin açısal momentumu $\vec{S}$). Veya iki parçacıktan oluşan bir sistemde parçacıkların açısal momentumları toplamı oluşturulabilir (örneğin, iki elektrondan oluşan bir sistemde $\vec{S}_1$ ve $\vec{S}_2$ spinleri).

Farklı serbestlik derecesine karşılık gelen bu iki açısal momentumu $\vec{J}_1$ ve $\vec{J}_2$ ile gösterelim. (Bu büyüklükler, hem yörünge açısal momentumu ve hem de spin için geçerli olacaktır.)

Bu sistemin *toplam açısal momentumu* $\vec{J}$ şöyle tanımlanır:

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \tag{8.10}$$

Açısal momentum vektörü için bilinen operatörleri burada da tanımlayabiliriz:

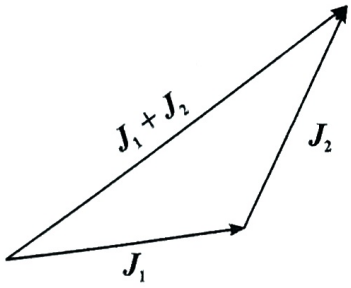
$$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2\vec{J}_1.\vec{J}_2 \tag{8.11}$$

$$J_z = J_{1z} + J_{2z} \tag{8.12}$$

$$J_\pm = J_x \pm iJ_y = J_{1+} \pm J_{2+} \tag{8.13}$$

Burada $\vec{J}_1.\vec{J}_2 = J_{1x}J_{2x} + J_{1y}J_{2y} + J_{1z}J_{2z}$ skaler çarpım olur.

Bu toplam açısal momentum hangi değerleri alabilir? Başka bir deyişle, J^2 ve J_z operatörlerinin özdeğerleri olan j ve m kuantum sayıları nasıl belirlenir?



Şekil 8.3: Açısal momentumların üçgen kuralına göre toplamı.

Klasik mekanikte vektörlerin toplamı için kullanılan *üçgen kuralı* burada da geçerlidir: $\vec{J}_1$ ve $\vec{J}_2$ vektörleri ile bunların toplamı $\vec{J}$ vektörü bir üçgenin kenarlarını oluştururlar (Şekil 8.3). Bu durumda, toplam vektörün büyüklüğü $j = j_1 + j_2$ (paralel durum) ile $j = |j_1 - j_2|$ (antiparalel durum) arasında olabilir. Ancak bu kez, toplam açısal momentum da kuantalandığından, tamsayı veya yarım tamsayı değerler alabilir:

$$j = |j_1 - j_2|,\ |j_1 - j_2| - 1,\ \ldots,\ j_1 + j_2 - 1,\ j_1 + j_2 \tag{8.14}$$

Ayrıca, toplam vektörün z-bileşeni, bu iki vektörün z-bileşenleri toplamına eşittir:

$$J_z = J_{1z} + J_{2z}$$

O halde, toplam açısal momentumun m kuantum sayısı

$$m = m_1 + m_2 \qquad \text{olur} \tag{8.15}$$

Örnek olarak, $j_1 = \frac{3}{2}$ ve $j_2 = 2$ olarak verilmiş olsun. Bu durumda, $|j_1 - j_2| = \frac{1}{2}$ ve $j_1 + j_2 = \frac{7}{2}$ olur. O halde, toplam açısal momentum, bu $\frac{1}{2}$ alt değerinden birer artarak, $\frac{7}{2}$ ye kadar her değeri alabilir:

$$j = \tfrac{1}{2},\ \tfrac{3}{2},\ \tfrac{5}{2},\ \tfrac{7}{2}$$

Ayrıca, $m_1 = -\frac{1}{2}$ ve $m_2 = +1$ verilmiş olsun. Bu durumda, toplam m nin değeri kesin olarak bellidir: $m = m_1 + m_2 = -\frac{1}{2} + 1 = +\frac{1}{2}$.

Toplam açısal momentumun alabileceği özdeğerleri bulduktan sonra, özvektörleri ele alalım.

j ve m kuantum sayılarıyla belirlenen öyle bir $\{|j\ m\rangle\}$ vektörler kümesi olsun ki

$$\begin{aligned} J^2\,|j\ m\rangle &= j(j+1)\hbar^2\,|j\ m\rangle \\ J_z\,|j\ m\rangle &= m\hbar\,|j\ m\rangle \end{aligned}$$

bağıntılarını sağlasın, yani $\{J^2, J_z\}$ operatörlerinin özvektörleri olsun.

Bunun için, $\vec{J}_1$ ve $\vec{J}_2$ açısal momentumlarının özvektörlerinden yola çıkalım: $\{J_1^2, J_{1z}\}$ operatörlerinin özfonksiyonlarını $|j_1\ m_1\rangle$ ile gösterelim. Benzer şekilde, $\{J_2^2, J_{2z}\}$ operatörlerinin özvektörleri de $|j_2\ m_2\rangle$ olsun:

$$J_1^2\,|j_1\ m_1\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2\,|j_1\ m_1\rangle \tag{8.16}$$

$$J_{1z}\,|j_1\ m_1\rangle = m_1\hbar\,|j_1\ m_1\rangle \tag{8.17}$$

$$J_2^2\,|j_2\ m_2\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2\,|j_2\ m_2\rangle \tag{8.18}$$

$$J_{2z}\,|j_2\ m_2\rangle = m_2\hbar\,|j_2\ m_2\rangle \tag{8.19}$$

Bu iki açısal momentum birbirinden bağımsız olduklarından sıra değiştirirler:

$$[J_1^2, J_2^2] = [J_{1z}, J_{2z}] = [J_1^2, J_{2z}] = [J_{1z}, J_2^2] = 0$$

O halde, herbir $|j_1\ m_1\rangle$ ve herbir $|j_2\ m_2\rangle$ özvektörlerinin çarpımı olan

$$|\chi\rangle = |j_1\ m_1\rangle|j_2\ m_2\rangle$$

vektörü $\{J_1^2, J_{1z}, J_2^2, J_{2z}\}$ operatörlerinin ortak özvektörüdür (yani, j_1, m_1, j_2, m_2 kuantum sayıları kesin olarak belirlidir).

Ancak, bu iki özvektörlerin çarpımıyla elde edilen $|\chi\rangle$ vektörleri, toplam açısal momentumun J^2 ve J_z operatörlerinin özvektörleri değildirler!

Örnek olarak, $j_1 = 1$ ve $j_2 = 1$ açısal momentumlarını ele alalım. Bu durumda, toplam açısal momentumun özdeğerleri $j = 0,\ 1,\ 2$ olabilir. $j = 0$ olan özvektörü nasıl kurabileceğimizi düşünelim. $j = 0$ olduğuna göre, ancak $m = 0$ olabilir. Aşağıdaki her üç çarpım da aynı $m_1 + m_2 = m = 0$ değerine sahiptir:

$$|1\ 0\rangle|1\ 0\rangle\ ,\qquad |1\ 1\rangle|1{-}1\rangle\ ,\qquad |1{-}1\rangle|1\ 1\rangle$$

O halde, bunların hiçbiri, yalnız başına $|j\ m\rangle = |0\ 0\rangle$ durumunu belirleyemez. Bunun matematiksel nedeni açıktır: Çünkü, J^2 operatörü J_{1z} ve J_{2z} ile sıra değiştirmez:

$$\begin{aligned} [J^2, J_{1z}] &= [J_1^2 + J_2^2 + 2J_{1x}J_{2x} + J_{1y}J_{2y} + J_{1z}J_{2z},\ J_{1z}] \\ &= [J_1^2, J_{1z}] + [J_2^2, J_{1z}] + 2[J_{1x}, J_{1z}]J_{2x} + 2[J_{1y}, J_{1z}]J_{2y} + 2[J_{1z}, J_{1z}]J_{2z} \\ &= 0 + 0 + 2(-i\hbar J_{1y})J_{2x} + 2(i\hbar J_{1x})J_{2y} + 0 \\ &= 2i\hbar(J_{1x}J_{2y} - J_{1y}J_{2x}) \neq 0 \end{aligned}$$

(benzer şekilde, J_{2z} ile de sıra değişmeyeceği gösterilebilir). Sıra değiştirmeyen operatörler de aynı anda belirlenemiyeceğinden, j özdeğeri belirsizdir.

Sorunun çözümü bellidir: Yukardaki örnekte, $|0\ 0\rangle$ durumu, bu üç çarpım durumların lineer kombinasyonu olmalıdır:

$$|0\ 0\rangle = c_1|1\ 0\rangle|1\ 0\rangle + c_2|1\ 1\rangle|1{-1}\rangle + c_3|1{-1}\rangle|1\ 1\rangle$$

Buradaki c_i katsayıları bilinirse, $|j\ m\rangle = |0\ 0\rangle$ özdurumu belirlenmiş olur.

O halde, problemi en genel haliyle ortaya koyalım: $\{|j_1\ m_1\rangle\}$ ve $\{|j_2\ m_2\rangle\}$ özvektör kümeleri kullanılarak toplam açısal momentumun özvektörleri yazıldığında

$$|j\ m\rangle = \sum_{m_1}\sum_{m_2} C_{j_1 m_1, j_2 m_2}\ |j_1\ m_1\rangle|j_2\ m_2\rangle \tag{8.20}$$

$C_{j_1 m_1, j_2 m_2}$ katsayıları nasıl bulunabilir? Bu katsayılar *Clebsch-Gordan katsayıları* olarak bilinir ve genel çözümü cebirsel olarak bulunabilir.

Clebsch-Gordan katsayılarının genel çözümü ileri düzeyde kitaplarda bulunabilir. Burada ilk birkaç j_1, j_2 değerleri için pratik bir yöntem göstereceğiz.

Basamak operatörleri J_+ ve J_- yi hatırlayalım. Bunların bir $|j\ m\rangle$ vektörüne etkisi daha önce görülmüştü:

$$\begin{aligned} J_+|j\ m\rangle &= \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\hbar\ |j\ m+1\rangle \\ J_-|j\ m\rangle &= \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\hbar\ |j\ m-1\rangle \end{aligned}$$

Bu özellikler J_{1+} ve J_{2-} için de geçerlidir.

Tekrar aynı $j_1 = 1$, $j_2 = 1$ örneğine dönelim ve katsayıların nasıl bulunacağını görelim. Önce, $\vec{J}_1$ ve $\vec{J}_2$ nin z eksenine paralel olduğu durum ele alınır. Bu durumda, m_1 ve m_2 kuantum sayıları maksimum değerlerinde olurlar: $m_1 = 1$, $m_2 = 1$ ve $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ olduğundan, $m = m_1 + m_2 = 2$ olur. Buradan $j = 2$ olduğu ortaya çıkar. O halde, $(j = 2, m = 2)$ durumu belirlenmiş demektir:

$$|2\ 2\rangle = |1\ 1\rangle|1\ 1\rangle$$

Bu vektöre basamak operatörü J_- etki ettirilirse, j değeri aynı kalacak, m değeri 1 eksilecektir. Yukardaki ifadeler yardımıyla

$$\begin{aligned} J_-|2\ 2\rangle &= (J_{1-} + J_{2-})|1\ 1\rangle|1\ 1\rangle \\ J_-|2\ 2\rangle &= (J_{1-}|1\ 1\rangle)|1\ 1\rangle + |1\ 1\rangle\ (J_{2-}|1\ 1\rangle) \\ \sqrt{2.3-2.1}\,|2\ 1\rangle &= \sqrt{1.2-1.0}|1\ 0\rangle|1\ 1\rangle + \sqrt{1.2-1.0}|1\ 1\rangle\ |1\ 0\rangle \\ 2|2\ 1\rangle &= \sqrt{2}|1\ 0\rangle|1\ 1\rangle + \sqrt{2}|1\ 1\rangle\ |1\ 0\rangle \end{aligned}$$

bulunur. Sonuç olarak $|j\ m\rangle = |2\ 1\rangle$ durumu elde edilmiş olur:

$$|2\ 1\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{2}}\ |1\ 0\rangle|1\ 1\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{2}}\ |1\ 1\rangle|1\ 0\rangle$$

Buradan itibaren iki yönde ilerlemek mümkündür:

- Basamak operatörü J_- tekrar tekrar etki ettirilerek sırasıyla $|2\ 0\rangle$, $|2-1\rangle$, $|2-2\rangle$ vektörleri bulunabilir.

- $|2\ 1\rangle$ durumundan $|1\ 1\rangle$ durumuna nası geçilir? Dikkat edilirse $|j\ m\rangle = |1\ 1\rangle$ vektörü de aynı iki vektörü ($|1\ 0\rangle|1\ 1\rangle$ ve $|1\ 1\rangle|1\ 0\rangle$) kullanarak yazılacaktır. O halde,

$$|1\ 1\rangle = c_1|1\ 0\rangle|1\ 1\rangle + c_2|1\ 1\rangle|1\ 0\rangle$$

olmalıdır. Bu vektörün $|2\ 1\rangle$ vektörüne dik olduğu yazılırsa

$$\langle 2\ 1|1\ 1\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{2}}\, c_1 + \sqrt{\tfrac{1}{2}}\, c_2 = 0$$

ve normlanırsa

$$\langle 1\ 1|1\ 1\rangle = |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

bu iki denklem arasında katsayılar $c_1 = \sqrt{1/2}$, $c_2 = -\sqrt{1/2}$ olarak bulunur. O halde, $|1\ 1\rangle$ durumu yazılabilir:

$$|1\ 1\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{2}}\,|1\ 0\rangle|1\ 1\rangle - \sqrt{\tfrac{1}{2}}\,|1\ 1\rangle|1\ 0\rangle$$

Buradan itibaren, tekrar basamak operatörüyle ilerlenir.

8.3.1 İKİ ELEKTRON SİSTEMİ

Açısal momentumların toplanmasına en basit örnek olarak, $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ durumunu, yani iki elektrondan oluşan izole bir sistemi inceleyelim. Bu sistem bir dış potansiyelde bulunmadığından elektronların toplam açısal momentumu sadece spinlerinin toplamı

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

olur. Yine $\{S^2, S_z\}$ operatörlerinin özvektörlerini $|s\ m\rangle$ ile gösterirsek, $s = 0$ veya $s = 1$ olacağı açıktır. Bu değerlere karşılık gelen spin özfonksiyonlarını kurmaya çalışalım.

Bir elektronun spin özvektörlerini $\alpha = |\frac{1}{2}\ +\frac{1}{2}\rangle$ ve $\beta = |\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\rangle$ ile göstermiştik. Buna göre, $s = 1$ özvektörleri

$$\begin{aligned} |1\ 1\rangle &= \alpha(1)\,\alpha(2) \\ |1\ 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,[\alpha(1)\,\beta(2) + \beta(1)\,\alpha(2)] \\ |1{-}1\rangle &= \beta(1)\,\beta(2) \end{aligned} \tag{8.21}$$

olurlar (burada 1 ve 2 indisleri elektronlardan herbirini belirtmektedir). Bu vektörlerden ilk ve sonuncusu doğrudan yazılabilirler, çünkü $m = 1$ olabilmesi için ancak $m_1 = m_2 = \frac{1}{2}$ olması gerekir.

$|1\ 0\rangle$ vektörünü ise, yukarda gösterildiği şekilde, basamak operatörü etkisiyle elde etmek mümkündür. Ancak, burada başka bir noktaya dikkati çekelim: $|1\ 1\rangle$ ve $|1-1\rangle$ vektörleri ifadelerinde 1 ve 2 indislerini yer değiştirdiğimizde, ifade yine aynı kalır. Başka bir deyişle, 1 ve 2 elektronlarının kimlikleri değişmesi durumunda bu özdurumlar simetriktir. Bölüm 10 da özdeş parçacık sistemleri incelendiğinde görüleceği üzere, bu sıra değiştirme simetrisi $|1\ 0\rangle$ vektörü için de doğru olmalıdır. $\alpha(1)\beta(2)$ ve $\beta(1)\alpha(2)$

çarpımlarının simetrik kombinasyonu ancak bu şekilde olabilir. Bunun doğru olup olmadığını kontrol etmek üzere

$$\begin{aligned} S^2|1\,0\rangle &= 1(1+1)\hbar^2\,|1\,0\rangle \\ S_z|1\,0\rangle &= 0 \end{aligned}$$

olduğu gösterilmelidir.

Benzer şekilde, $|0\,0\rangle$ vektörünün $|1\,0\rangle$ vektörüne dik olma özelliğini kullanarak

$$|0\,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,[\alpha(1)\,\beta(2) - \beta(1)\,\alpha(2)]$$

yazabiliriz. Bu vektörün ise, 1 ve 2 elektronları sıra değiştirdiğinde, antisimetrik olduğuna dikkati çekelim.

$s = 1$ olan *üçlü-durum* (triplet) sisteminde iki spinin *paralel*, $s = 0$ olan *tekli-durumda* (singlet) ise spinlerin *antiparalel* oldukları söylenebilir.

8.3.2 SPİN $\frac{1}{2}$ PARÇACIĞIN TOPLAM DALGA FONKSİYONU

Hem uzay koordinatı ve hem de spin durumunu içeren dalga fonksiyonu nasıl yazılmalıdır? Verilen bir $\vec{r}$ konumlu yerde parçacığın spin durumu $\pm\frac{1}{2}$ olabileceği için skaler bir $\psi(\vec{r})$ dalga fonksiyonu yeterli olamaz. Bu durumda, *iki bileşenli dalga fonksiyonları* kullanmak gerekir.

Spin ve uzay operatörleri sıra değiştirdiği için, en genel dalga fonksiyonu bu iki uzaydaki dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazılabilir:

$$\Psi(\vec{r}, m_s) = \psi(\vec{r})\chi_{m_s} \tag{8.22}$$

Buradaki spin dalga fonksiyonu χ baz vektörleri α ve β nin bir süperpozisyonu olur:

$$\chi_{m_s} = c_+\alpha + c_-\beta = c_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \tag{8.23}$$

Böylece, toplam dalga fonksiyonu

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, m_s) &= \psi(\vec{r}) \left\{ c_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \\ &= \psi_+(\vec{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_-(\vec{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \\ \psi_+(\vec{r}) &= c_+\Psi(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) &= c_-\Psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

Spinör denilen bu iki bileşenli dalga fonksiyonlarının olasılık yorumu şöyledir:

$|\psi_+(\vec{r})|^2$: $\vec{r}$ konumlu yerde parçacığın yukarı spinli olma olasılığı

$|\psi_-(\vec{r})|^2$: $\vec{r}$ konumlu yerde parçacığın aşağı spinli olma olasılığı

Parçacığın spin yönüne bakılmaksızın $\vec{r}$ konumlu bir yerde bulunma olasılığı:

$$|\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2 = \begin{pmatrix} \psi_+^*(\vec{r}) & \psi_-^*(\vec{r}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \Psi^\dagger(\vec{r})\Psi(\vec{r})$$

ve normlanma koşulu

$$\int_V dV\ \Psi^\dagger(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = \int_V dV\ \{|\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2\} = 1 \qquad \text{yazılabilir.}$$

Dinamik değişkenlerin bu iki bileşenli dalga fonksiyonlarına etkisi nasıl olur?

Uzay koordinatları $\vec{r}$ ve $\vec{p}$ ye bağlı değişkenler, spin kısmına dokunmaksızın, sadece $\psi_+(\vec{r})$ ve $\psi_-(\vec{r})$ bileşenlerine etki ederler. Başka bir deyişle, spin kuantum sayısının değişmesine yol açmazlar. Spin operatörleri ise, $\psi_+(\vec{r})$ ve $\psi_-(\vec{r})$ bileşenlerinin, $\vec{r}$-ye bağımlılığına dokunmaksızın, sütun vektöründeki yerlerini değiştirebilirler.

Bir örnek olmak üzere, toplam açısal momentum operatörü $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ nin J_x bileşeninin etkisini hesaplayalım:

$$\begin{aligned} J_x\Psi &= (L_x + \frac{\hbar}{2}\sigma_x)\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \\ &= L_x \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} L_x\psi_+(\vec{r}) \\ L_x\psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \psi_-(\vec{r}) \\ \psi_+(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_x\psi_+ + \frac{\hbar}{2}\psi_- \\ L_x\psi_- + \frac{\hbar}{2}\psi_+ \end{pmatrix} \end{aligned}$$

8.3.3 HİDROJEN ATOMU ÖZVEKTÖRLERİ

Şimdi, hidrojen atomu için bir elektronun özfonksiyonlarını yazalım. n temel kuantum sayılı bir l yörüngesindeki elektronun spin serbestlik derecesini de hesaba katan en genel özfonksiyonu

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) &= \psi_{nlm_l}(\vec{r})\,|\tfrac{1}{2}\ m_s\rangle \\ \psi_{nlm_l}(\vec{r}) &= R_{nl}(r)\,Y_l^{m_l}(\theta,\phi) \end{aligned} \qquad (8.24)$$

olur. Burada, yörünge magnetik kuantum sayısını m_l ile, spin z-bileşenini ise m_s ile gösteriyoruz. m_s bileşeninin alabileceği değerlere göre $|\frac{1}{2}\ m_s\rangle$ özvektörü α veya β dan biri olur.

Hidrojen atomu incelendiğinde (Bölüm 6) E_n enerji özdeğerlerinin sadece n kuantum sayısına bağlı ve $l = 0, 1, \ldots, n-1$ ve $m_l = -l, \ldots, l$ ve $m_s = \pm\frac{1}{2}$ olan tüm durumların katlı olduğu görülmüştü. Bir n enerji düzeyindeki katlı durumların toplam sayısı bulalım:

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m_l=-l}^{l}\sum_{m_s=-1/2}^{+1/2} 1 &= \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)\times 2 = 4\sum_{l=0}^{n-1} l + 2\sum_{l=0}^{n-1} 1 \\ &= 4\frac{n(n-1)}{2} + 2n = 2n^2 \end{aligned}$$

olur.

Bu dalga fonksiyonuna L^2, L_z operatörleriyle etki edildiğinde $l(l+1)\hbar^2$ ve $m_l\hbar$ değerleri bulunacağı açıktır. Benzer şekilde, S^2, S_z operatörlerinin etkisi ile $\frac{3}{4}\hbar^2$ ve $m_s\hbar$ özdeğerleri bulunur.

Ancak toplam açısal momentumu $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ nin etkisi için ne söyleyebiliriz? Kısım 8.3 de iki açısal momentumun toplanması incelendiğinde görüldü ki bu dalga fonksiyonu J^2 operatörünün özvektörü değildir.

O halde, bu özfonksiyonları kullanarak toplam açısal momentumun (yani, J^2 ve J_z nin) özfonksiyonlarını kurmamız gerekir.

Niçin bu $|J\,M\rangle$ özdurumlarıyla ilgileniyoruz? Çünkü, gerçek hidrojen atomu Bölüm 6 da incelendiği kadar basit değildir. Bir sonraki kısımda görüleceği üzere, spin ve yörünge açısal momentumları arasındaki etkileşme nedeniyle, L_z ve S_z bileşenleri değişikliğe uğrayabildiği halde, toplam açısal momentum $\vec{J}$ ve onun J_z bileşeni sabit kalır. O halde, toplam açısal momentumun özvektörleriyle çalışmak gerekir.

Tekrar $|j\,m\rangle$ vektörlerine dönelim. Clebsch-Gordan katsayıları kullanılarak

$$|j\,m\rangle = \sum_{m_l}\sum_{m_s} C_{lm_l,\frac{1}{2}m_s} Y_l^{m_l} |\tfrac{1}{2}\,m_s\rangle \tag{8.25}$$

özdurumlarını elde etmek gerekir (burada $m = m_l + m_s$ olacağından, gerçekte bir tek toplama vardır). $S = \frac{1}{2}$ olduğundan toplam açısal momentum $j = l - \frac{1}{2}$ veya $j = l + \frac{1}{2}$ olabilir (ancak, $l = 0$ için sadece $j = \frac{1}{2}$ değeri olabilir).

Herbir j değeri için m kuantum sayısı $2j+1$ farklı değer alabilir. Bu nedenle $|j\,m\rangle$ özdurumlarının katlılık derecesi $2j+1$ olur.

Bir $|j\,m\rangle$ vektörü kurulduktan sonra, radyal dalga fonksiyonu da katılarak hidrojen atomu dalga fonksiyonları yazılabilir:

$$\psi_{nljm} = R_{nl}(r)\,|j\,m\rangle \tag{8.26}$$

Bu ψ_{nljm} fonksiyonları da aynı enerji özdeğerlerine sahiptirler, çünkü hidrojen atomu enerji düzeyleri sadece n kuantum sayısına bağlıdır, $|l\;m\rangle$ durumlarının kombinasyonu enerjiyi etkilemez.

Herhangi bir l değeri için, $|j\,m\rangle$ fonksiyonlarının genel ifadesini burada ispatsız verelim:

$j = l - \frac{1}{2}$ için:

$$|j\,m\rangle = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_l^{m-\frac{1}{2}}\,|\tfrac{1}{2}\,+\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_l^{m+\frac{1}{2}}\,|\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle$$

$j = l + \frac{1}{2}$ için:

$$|j\,m\rangle = \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_l^{m-\frac{1}{2}}\,|\tfrac{1}{2}\,+\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_l^{m+\frac{1}{2}}\,|\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle$$

Alıştırma 8.5 : Hidrojen atomunda $l = 0$ ve $l = 1$ durumları için toplam açısal momentumun alabileceği değerleri ve bu durumlara karşılık gelen özvektörleri bulun.

s-Durumu Özfonksiyonları

$l = 0$ için toplam açısal momentum ancak $j = s = \frac{1}{2}$ değerinde olabilir ve $m = m_s = \pm\frac{1}{2}$ olur. $|j\ m\rangle$ durumları doğrudan yazılabilir:

$$|\tfrac{1}{2}\ m\rangle = Y_0^0\ |\tfrac{1}{2}\ m\rangle \qquad (m = -\tfrac{1}{2},\ +\tfrac{1}{2})$$

s durumlarının, spin serbestlik derecesinden dolayı, iki kez katlı oldukları görülmektedir.

p-Durumu Özfonksiyonları

$l = 1$ için toplam açısal momentum $j = |1 - \frac{1}{2}| = \frac{1}{2}$ ve $j = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$ değerleri alabilir. Toplam açısal momentumu $j = \frac{3}{2}$ olan durumları önce ele alalım.

Clebsch-Gordan katsayılarını pratik olarak bulma yöntemi kullanılırsa, önce m nin maksimum olduğu $|\frac{3}{2}\ +\frac{3}{2}\rangle$ durumu doğrudan yazılır:

$$|\tfrac{3}{2}\ +\tfrac{3}{2}\rangle = Y_1^1\ |\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle = |1\ 1\rangle|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle$$

Bu ifadeye $J_- = L_- + S_-$ operatörüyle etki edildiğinde

$$\begin{aligned}
J_-|j\ m\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}|j\ m-1\rangle \\
J_-|\tfrac{3}{2}\ +\tfrac{3}{2}\rangle &= (L_-|1\ 1\rangle)\ |\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle + |1\ 1\rangle\ (S_-|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle) \\
\sqrt{3}|\tfrac{3}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle &= \sqrt{2}|1\ 0\rangle|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{1}|1\ 1\rangle|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle \\
|\tfrac{3}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |1\ 0\rangle|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{3}}\ |1\ 1\rangle|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle \qquad \text{bulunur.}
\end{aligned}$$

Benzer şekilde, $j = \frac{3}{2}$ özdeğerinin diğer vektörleri

$$\begin{aligned}
|\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\tfrac{1}{3}}\ |1{-}1\rangle|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |1\ 0\rangle|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle \\
|\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{3}{2}\rangle &= |1{-}1\rangle|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle
\end{aligned}$$

olur. $j = \frac{3}{2}$ değerine 4 tane özvektör karşılık gelmektedir.

$j = \frac{1}{2}$ olan durumlara geçebilmek için diklik koşulu kullanılır. Sonuçlar

$$\begin{aligned}
|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\tfrac{1}{3}}\ |1\ 0\rangle|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |1\ 1\rangle|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle \\
|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |1{-}1\rangle|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\tfrac{1}{3}}\ |1\ 0\rangle|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle
\end{aligned}$$

olur. Bu durumların katlılık derecesi de ($2j + 1 = 2$) dir. Tüm bu özvektörlerin birbirine dik ve normlanmış olduğu kolayca görülebilir.

8.4 SPİNE BAĞIMLI ETKİLEŞMELER

Bölüm 6 da incelenen hidrojen atomu hamiltonyeninde spine bağlı bir terim yoktu. Böylece, n kuantum sayısıyla belirlenen enerji özdeğerleri ve (n, l, m_l) sayılarıyla belirle-

nen özfonksiyonlar elde edilmişti. Spin serbestlik derecesi hesaba katıldığında, bu hamiltonyen değişikliğe uğrar. Bunu görebilmek için klasik elektrodinamikten bilinen magnetik moment kavramına yeniden eğilmek gerekir.

Bir elektronun magnetik momenti hem yörünge açısal momentumu ve hem de spinden oluşur. Yörünge magnetik momenti Bölüm 7 de görülmüştü:

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e\hbar}{2m_e c}\vec{L} = -\mu_B \vec{L} \tag{8.27}$$

Spin magnetik momenti de benzer şekilde fakat biraz farklı tanımlanır:

$$\vec{\mu}_S = -\frac{e\hbar}{m_e c}\vec{S} = -2\mu_B \vec{S} \tag{8.28}$$

(Buradaki faktörün niçin 2 olduğu ancak rölativistik kuantum teorisinde açıklanabilir). Herbir magnetik momentin kendi açısal momentumuna *antiparalel* olduğuna dikkati çekelim.

Böylece, toplam magnetik moment

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = -\mu_B\,(\vec{L} + 2\vec{S}) = -\mu_B\,(\vec{J} + \vec{S}) \tag{8.29}$$

olur. Burada çok önemli bir noktayı vurgulayalım: *Elektronun toplam magnetik momenti* $\vec{\mu}$ *toplam açısal momentum vektörü* $\vec{J}$ *ile aynı doğrultuda değildir.* Bu özelliğe Zeeman olayını incelerken tekrar döneceğiz.

Bir elektronun etkileşmesinde bu magnetik momentler hesaba katıldığında hamiltonyen yeni terimler kazanır:

- Hidrojen atomu bir dış magnetik alana konduğunda elektronun magnetik momenti vasıtasıyla bir etkileşmeye uğrar. Bu etkileşmenin hidrojen hamiltonyenine katkısı

  $$V_{\text{mag}} = -\vec{B}.(\vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S) = \mu_B \vec{B}.(\vec{L} + 2\vec{S}) = \mu_B \vec{B}.(\vec{J} + \vec{S})$$

  olur. O halde, daha önce incelediğimiz Zeeman olayı (Kısım 7.1) gerçekte, toplam açısal momentum alınarak incelenmelidir.

- Bir dış magnetik alan olmasa bile, spin ve yörünge magnetik momentleri kendi aralarında etkileşirler. *Spin-yörünge etkileşmesi* denilen bu enerji iki magnetik momentin etkileşmesi şeklinde verilir:

  $$V_{\text{L–S}} = f(r)\,\vec{\mu}_L.\vec{\mu}_S = f(r)\,\vec{L}.\vec{S}$$

  Burada $f(r)$ sadece radyal r koordinatına bağlı olabilen bir fonksiyondur.

- Çok elektronlu atomlarda ise iki elektron spini arasında etkileşme olabilir:

  $$V_{\text{S–S}} = \text{sabit} \times\ \vec{S}_1.\vec{S}_2$$

Şimdi bu etkileşmeleri hesaplayalım.

8.4.1 SPİN-YÖRÜNGE ETKİLEŞMESİ ve İNCE YAPI

Alkali atomların taban durumu ele alındığında, elektronlar daha altlardaki enerji düzeylerini (2,8,18,..) doldurduktan sonra geriye bir s düzeyine yerleşen bir elektron kalır (*valans elektronu*). Oldukça geçerli bir yaklaşım olarak, bu kapalı düzeylerdeki elektronların artık dış dünyayla etkileşmedikleri varsayılırsa, atomun durumu sadece valans elektronunun bulunacağı durumun (n,l,j,m) kuantum sayılarıyla belirlenir. Coulomb potansiyelinde bulunan bu elektronun spin-yörünge etkileşmesi de hesaba katılırsa hamiltonyen

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} + f(r)\vec{L}.\vec{S} \tag{8.30}$$

olur. Buradaki spin-yörünge terimi Coulomb etkileşmesine göre zayıf olur. O halde, 1. dereceden pertürbasyon yöntemi uygulamak üzere

$$\begin{aligned} H &= H_0 + V \\ H_0 &= \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \\ V_{L-S} &= f(r)\vec{L}.\vec{S} \end{aligned}$$

yazalım. H_0 hamiltonyeni Bölüm 6 da incelenmişti. Bunun özdeğer ve özfonksiyonları n,l,j,m kuantum sayılarına bağlı olarak yazılırsa

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= -\frac{13.6Z^2}{n^2} \\ u_{nljm} &= R_{nl}(r)\ |j\ m\rangle \end{aligned}$$

olur. Buradaki toplam açısal momentumun özvektörleri $|j\ m\rangle$ lerin nasıl kurulacağı bir önceki kısımda incelenmişti.

O halde, enerji özdeğerlerine birinci dereceden katkıyı veren

$$E_n^{(1)} = (u_n, V_{L-S}u_n)$$

ifadesini enerji değerlerindeki değişme olarak

$$\Delta E_{L-S} = (u_{nljm}, f(r)\vec{L}.\vec{S}\ u_{nljm})$$

şeklinde yazarsak, bu skaler çarpım bir radyal ve bir de açısal iki kısma ayrılır:

$$\Delta E_{L-S} = \langle j\ m|\vec{L}.\vec{S}|j\ m\rangle \int_0^\infty dr\, r^2\, f(r)|R_{nl}(r)|^2$$

Önce açısal kısmı ele alalım. Buradaki $\vec{L}.\vec{S}$ terimi $\vec{J}$ cinsinden şöyle yazılabilir:

$$\begin{aligned} J^2 &= (\vec{L}+\vec{S})^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{L}.\vec{S} \\ \vec{L}.\vec{S} &= \frac{J^2 - L^2 - S^2}{2} \end{aligned}$$

Buradaki her operatör bir $|j\ m\rangle = \sum_{m_s} Y_l^{m_l} |\frac{1}{2}\ m_s\rangle$ vektörüne etkidiğinde kendi özdeğerini verecektir. O halde, açısal kısmın sonucu

$$\langle j\ m|\vec{L}.\vec{S}|j\ m\rangle = \frac{1}{2}\langle j\ m|(J^2 - L^2 - S^2)|j\ m\rangle \tag{8.31}$$

$$= [j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}]\ \frac{\hbar^2}{2} \tag{8.32}$$

bulunur (burada spin özdeğeri $s = \frac{1}{2}$ olduğundan $s(s+1) = \frac{3}{4}$ yazıldı).

Bu sonuca göre, toplam açısal momentumun $j = l - 1$ veya $j = l + 1$ oluşuna göre, enerji özdeğerindeki değişiklik farklı olacaktır:

$$\langle j\ m|\vec{L}.\vec{S}|j\ m\rangle = \begin{cases} l\,\hbar^2/2, & (j = l + \frac{1}{2} \text{ ise}) \\ -l(l+1)\,\hbar^2/2\,, & (j = l - \frac{1}{2} \text{ ise}) \end{cases} \tag{8.33}$$

Radyal integral içindeki $f(r)$ fonksiyonunun analitik ifadesi, çekirdek ve diğer elektronların ortalama etkileşmesi ve ayrıca rölativite teorisi hesaba katıldığında

$$f(r) = \frac{1}{2m^2c^2}\ \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}$$

şeklinde olacağı kabul edilir. Burada $V(r)$ Coulomb potansiyeli olduğuna göre

$$f(r) = \frac{Ze^2}{2m^2c^2}\ \frac{1}{r^3}$$

olur ve radyal integral

$$I_{nl} = \int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2\ r^{-3}\ r^2\ dr$$

olur. Bu integralin değeri hesaplanırsa

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \frac{Z^3}{n^3a^3}\ \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$$

bulunur. Burada *ince yapı sabiti* adlı yeni bir sabit tanımlanır ve Z yüklü bir çekirdek için enerji düzeyleri ifadesi hatırlatılırsa

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \qquad \textit{(İnce yapı sabiti)} \tag{8.34}$$

$$\varepsilon_n = -\frac{mZ^2e^4}{\hbar^2 n^2}$$

sonuç olarak, spin-yörünge etkileşmesinden dolayı yeni enerji düzeyleri

$$E_{nlj} = \varepsilon_n + \Delta E_{L-S} = \begin{cases} -|\varepsilon_n| \left\{ 1 - \dfrac{1}{(l+1)(2l+1)} \dfrac{(Z\alpha)^2}{n} \right\} & (j = l + \frac{1}{2}) \\ -|\varepsilon_n| \left\{ 1 + \dfrac{1}{l(2l+1)} \dfrac{(Z\alpha)^2}{n} \right\} & (j = l - \frac{1}{2}) \end{cases} \tag{8.35}$$

olur. Böylece, $l \neq 0$ olan her enerji düzeyi birbirine yakın iki değere ayrışır ($l = 0$ olan s düzeyi hariç, bu düzey için ancak $j = \frac{1}{2}$ olabilir). Bunlardan, $j = l + \frac{1}{2}$ olanı yukarı itilirken, diğeri aşağı çekilir. Sodyum spektrumundaki çift sarı ışığın kaynağı bu spin-yörünge etkileşmesidir.

Ancak, deneysel gözlemlere uyum sağlaması açısından, spin-yörünge etkileşmesi yanısıra, elektronun ışık hızına yakın hareket etmesi nedeniyle, bir de relativistik terim oluşur. Bu ikisinin birlikte etkisi deneysel gözlemlerle uyumlu olur.

8.4.2 ZEEMAN OLAYI

Şimdi Kısım 7.1 de *normal Zeeman olayı* olarak incelediğimiz magnetik alanda hidrojen atomu problemine tekrar dönelim ve en genel haliyle inceleyelim. Magnetik alan z-yönünde seçilirse yukarda verilen etkileşme terimini içeren hidrojen hamiltonyeni (spin-yörünge etkileşmesini de katarak)

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} + f(r)\vec{L}.\vec{S} + \mu_B B\,(J_z + S_z) \tag{8.36}$$

olur.

Önce magnetik alanın oldukça şiddetli olduğu durumu inceleyelim. *Kuvvetli Zeeman olayı* olarak bilinen bu durumda spin-yörünge terimi ihmal edilebilir. Kalan terim yine 1. derece pertürbasyon yaklaşımında ele alınırsa enerji düzeylerindeki değişme

$$\Delta E_{\text{mag}} = \mu_B B\,(\psi, [J_z + S_z]\psi)$$

olur. Buradaki J_z operatörü yerine $L_z + S_z$ kullanılırsa etkileşme operatörü $L_z + 2S_z$ olur ve problemin çözümünde toplam açısal momentumun özvektörleri $|j\ m\rangle$ lerin kullanılmasına gerek olmadığı, $|l\ m_l\rangle|\frac{1}{2}\ m_s\rangle$ çarpım vektörlerinin yeterli olduğu görülür. O halde, sonuç bu operatörlerin özdeğerlerine orantılı olur:

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{mag}} &= \mu_B B\,\left(\langle\tfrac{1}{2}\ m_s|\langle l\ m_l|\right)[L_z + 2S_z]\left(|l\ m_l\rangle|\tfrac{1}{2}\ m_s\rangle\right) \\ &= \mu_B B\,(m_l + 2m_s) \end{aligned} \tag{8.37}$$

Bu sonuca göre, n, l kuantum sayılarıyla belirlenen bir enerji düzeyi $2 \times (2l + 1)$ tane farklı enerjiye sahip düzeylere ayrışır ve katlılık tamamen kalkar (yine de kazayla bazı $m_l + m_s$ değerleri aynı olursa katlılık devam edebilir).

Şimdi, magnetik etkileşme teriminin spin-yörünge terimiyle aynı mertebede olduğu *zayıf Zeeman olayını* ele alalım. Bu kez spin-yörünge etkileşmeli hidrojen atomunun çözümünü biliniyor varsayalım ve pertürbasyon uygulamak için

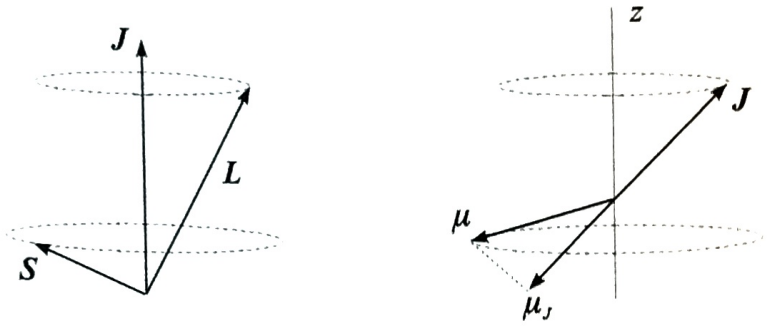
$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} + f(r)\,\vec{L}.\vec{S} \\ u_n &= R_{nl}|j\ m\rangle \\ V_{\text{mag}} &= \mu_B B\,(L_z + 2S_z) \end{aligned}$$

alalım (burada, spin-yörünge etkileşmesi zayıf olduğu için özfonksiyonların radyal kısmının değişmediği varsayılmaktadır). Buna göre, magnetik etkileşmenin enerji düzeylerine oluşturduğu katkı yazılabilir:

$$\Delta E_{\text{mag}} = (u_n, \mu_B B\,(L_z + 2S_z)\,u_n) = (u_n, \mu_B B\,(L_z + 2S_z)\,u_n)$$

Bu ifadeyi hesaplarken toplam $|j\ m\rangle$ özvektörlerini kullanmamız gerekiyor. Oysa, bu vektörler etkileşme terimindeki S_z operatörünün özvektörleri değildirler. Problemin tam çözümü için $|j\ m\rangle$ vektörlerini $|j\ m\rangle = \sum C_{lm_l,sm_s}|l\ m_l\rangle|\frac{1}{2}\ m_s\rangle$ şeklinde yazıp hesap yapılmalıdır. Ancak bu, Clebsch-Gordan katsayılarıyla uzun işlemler gerektirir. Oysa, aynı sonucu olayın fiziğine bakarak elde edebiliriz:

Yörünge ve spin için tanımlanan $\vec{\mu}_L$ ve $\vec{\mu}_S$ vektörleri arasında dipol-dipol etkileşmesi nedeniyle bir dönme momenti (tork) oluşacak ve birbirinin hareketini etkileyeceklerdir. Ancak, başka dış kuvvet yoksa sistemin toplam açısal momentumu sabit kalmalıdır. Bunun mümkün olabilmesi için $\vec{L}$ ve $\vec{S}$ açısal momentumları toplam $\vec{J}$ ekseni etrafında *aynı* açısal hızla dönmelidirler (presesyon hareketi).



(a) (b)

Şekil 8.4: (a) Yörünge ve spin açısal momentumlarının presesyon hareketi. (b) Magnetik momentin $\vec{J}$ yönündeki izdüşümü olan $\vec{\mu}_J$ vektörü.

Açısal momentumu $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ olan bir elektronun magnetik momentinin

$$\vec{\mu} = -\mu_B(\vec{L} + 2\vec{S}) = -\mu_B(\vec{J} + \vec{S})$$

ifadesiyle verildiğinden dolayı $\vec{J}$ ile antiparalel yönde olmadığını görmüştük. $\vec{L}$ ve $\vec{S}$ vektörleri $\vec{J}$ ekseni etrafında dönerken toplam $\vec{\mu}$ vektörü de aynı eksen etrafında dönecektir (Şekil 8.4). Bu dönme hareketi nedeniyle magnetik momentin ancak $\vec{J}$ doğrultusundaki izdüşümü enerjiye katkıda bulunur, diğer bileşenin ortalama katkısı sıfır olur. O halde, $\vec{J}$ doğrultusundaki $\vec{\mu}_J$ magnetik momenti bulalım ve bunun enerjiye katkısını hesaplayalım.

$\vec{\mu}$ vektörünü $\vec{J}$ doğrultusundaki birim vektör ($\hat{j} = \vec{J}/J$) ile çarparsak μ_J nin büyüklüğünü bulmuş oluruz. Bunu $\vec{J}$ doğrultusunda bir vektör yapmak için yine $\hat{j}$ ile çarpmak gerekir.

$$\begin{aligned}
\vec{\mu}_J &= (\vec{\mu}.\hat{j})\,\hat{j} = \frac{\vec{\mu}.\vec{J}}{J}\,\frac{\vec{J}}{J} = \frac{\vec{\mu}.\vec{J}}{J^2}\,\vec{J} \\
&= -\frac{\mu_B(\vec{L} + 2\vec{S}).(\vec{L} + \vec{S})}{J^2}\,\vec{J} \\
&= -\mu_B\frac{L^2 + 2S^2 + 3\vec{L}.\vec{S}}{J^2}\,\vec{J}
\end{aligned}$$

$\vec{L}.\vec{S}$ terimini yine J^2 li ifadeyle yazarsak

$$\begin{aligned}\vec{\mu}_J &= -\mu_B \frac{L^2+2S^2+3(J^2-L^2-S^2)/2}{J^2}\,\vec{J} \\ &= -\mu_B \frac{3J^2+S^2-L^2}{2J^2}\vec{J} = -\mu_B\left(1+\frac{J^2+S^2-L^2}{2J^2}\right)\vec{J}\end{aligned}$$

olur. O halde, hamiltonyendeki ikinci terim yerine $-\vec{B}.\vec{\mu}_J = -B\mu_{J_z}$ kullanabiliriz. Bu terim de yine $|j\ m\rangle$ vektörleriyle hesaplanabilir:

$$\begin{aligned}\Delta E_{\text{mag}} &= -\langle j\ m|\ \mu_B B\ \mu_{J_z}\ |j\ m\rangle \\ &= \mu_B B\ \langle j\ m|\ \left[1+\frac{J^2+S^2-L^2}{2J^2}\right] J_z\ |j\ m\rangle \\ &= \mu_B B\ \left[1+\frac{j(j+1)-\frac{3}{4}-l(l+1)}{2j(j+1)}m\right]\end{aligned}$$

Burada *Lande g-faktörü* adında boyutsuz bir sabit tanımlanırsa sonuç yazılabilir:

$$g = 1+\frac{j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}}{2j^2} \qquad \text{(Lande } g\text{-faktörü)} \qquad (8.38)$$

$$\Delta E_{\text{mag}} = g\mu_B B\ m \qquad (8.39)$$

Böylece, magnetik alanda her enerji düzeyi $2j+1$ düzeye ayrışır. Ancak ayrışma miktarı, Lande g-faktöründen dolayı herbir j,l çifti için farklı olacaktır.

Alıştırma 8.6 : Sodyum atomunun $^2S_{1/2}$, $^2P_{1/2}$ ve $^2P_{3/2}$ düzeylerinin zayıf Zeeman olayında nasıl değiştiğini inceleyin.

Çözüm : Burada spektroskopik notasyonu hatırlatalım: (n,l,j) kuantum sayılarıyla gösterilen bir durum spektroskopik notasyonda

$$^{2s+1}L_j$$

ile temsil edilir (çok elektronlu atomlar için büyük har er kullanılır). Bu örnekte $^2P_{1/2}$ ve $^2P_{3/2}$ durumları spin-yörünge etkileşmesiyle iki farklı enerjiye sahiptirler. Bu notasyona göre (tek elektron için $s=\frac{1}{2}$):

$^2S_{1/2}$ durumu için : $l=0,\quad j=\frac{1}{2}$

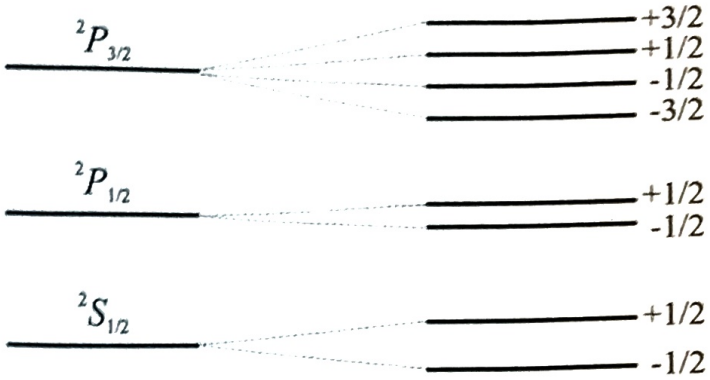
$^2P_{1/2}$ durumu için : $l=1,\quad j=\frac{1}{2}=l-\frac{1}{2}$

$^2P_{3/2}$ durumu için : $l=1,\quad j=\frac{3}{2}=l+\frac{1}{2}$ alınmalıdır.

Bu durumlar için yukarda verilen Lande g-faktörü ve enerji farkı ifadeleri hesaplanır:

$^2S_{1/2}$ durumu için : $g=2 \quad \Delta E_{\text{mag}} = 2\mu_B B\ m \quad (m=\pm\frac{1}{2})$

$^2P_{1/2}$ durumu için : $g=\frac{2}{3} \quad \Delta E_{\text{mag}} = \frac{2}{3}\mu_B B\ m \quad (m=\pm\frac{1}{2})$



Şekil 8.5: Zeeman olayının enerji düzeylerine etkisi.

$^2P_{3/2}$ durumu için : $g = \frac{4}{3}$ $\Delta E_{\text{mag}} = \frac{4}{3}\mu_B B\, m$ $(m = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2})$ olur.

Şekil 8.5 de bu durumlar için Zeeman olayının etkisi görülmektedir.

PROBLEMLER

8.1 *Bir sistemin her $|\psi\rangle$ durumunda, hermitik bir A operatörünün karesinin beklenen değerinin pozitif olacağını, yani*

$$\langle A^2 \rangle \geq 0$$

olacağını gösterin.

8.2 *Bir sistemde $\{J^2, J_z\}$ operatörlerinin $|j\ m\rangle$ özdurumlarında J_x ve J_y operatörlerinin beklenen değerlerinin sıfır olduğunu*

$$\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0 \text{ gösterin.}$$

8.3 *Pauli spin matrisleri için aşağıdaki bağıntıların doğruluğunu gösterin:*

$$\begin{aligned} [\sigma_x, \sigma_y] &= 2i\sigma_z \\ \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x &= 0 \\ \sigma_x\sigma_y\sigma_z &= 1 \end{aligned}$$

8.4 *Pauli spin matrislerinin herbiri için (örneğin, σ_x)*

$$e^{i\sigma_x\phi} = \cos\phi\ \mathbb{I} + i\sin\phi\ \sigma_x$$

olduğunu gösterin (Not: Bir operatörün üstel fonksiyonu Taylor açılımıyla tanımlanır).

8.5 *$j = 1$ açısal momentumuna sahip bir parçacığın durumu*

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

olarak veriliyor. J_z bileşeni ölçüldüğünde $m = 0$ bulma olasılığı nedir?

8.6 *Spini $\frac{1}{2}$ olan bir parçacığın iki bileşenli dalga fonksiyonu*

$$\psi_+(\vec{r}) = A\,e^{-r}\left[Y_0^0 + \frac{1}{\sqrt{3}}Y_1^0\right]$$
$$\psi_-(\vec{r}) = \frac{e^{-r}}{\sqrt{3}}\left[Y_1^1 - Y_1^0\right]$$

olarak veriliyor.

(a) Bu dalga fonksiyonunun normlanması için A ne olmalıdır?

(b) S_z bileşeni ölçüldüğünde hangi değerler hangi olasılıklarla bulunur?

(c) L_z bileşeni ölçüldüğünde hangi değerler hangi olasılıklarla bulunur?

8.7 *$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ toplam açısal momentumu için*

$$[J^2, L_z] = 2i\hbar(L_xS_y - L_yS_x)$$
$$[J^2, S_z] = 2i\hbar(S_xL_y - S_yL_x)$$

olduğunu gösterin.

8.8 *İki elektron sisteminde $|1\,0\rangle$ durumu için*

$$S^2|1\,0\rangle = 2\hbar^2\,|1\,0\rangle$$
$$S_z|1\,0\rangle = 0$$

olduğunu gösterin.

8.9 *İki elektron sisteminde $\vec{\sigma}_1.\vec{\sigma}_2$ operatörünün üçlü ve tekli durumlara etkisinin*

$$\vec{\sigma}_1.\vec{\sigma}_2\,|0\,0\rangle = -3|0\,0\rangle$$
$$\vec{\sigma}_1.\vec{\sigma}_2\,|1\,0\rangle = |1\,0\rangle$$

olduğunu gösterin (burada $\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2$ 1. ve 2. elektron için Pauli spin matrisleridir: $\vec{\sigma}_1 = (\sigma_{1x}, \sigma_{1y}, \sigma_{1z})$.)

8.10 *Bir d-durumundaki ($l = 2$) elektronun $j = l \pm 1$ özdeğerlerine karşılık gelen $|j\ m\rangle$ özvektörlerinden $|\frac{5}{2}\ +\frac{3}{2}\rangle$ ve $|\frac{3}{2}\ +\frac{3}{2}\rangle$ yi kurun.*

8.11 *Aşağıda verilen spektroskopik notasyonda herbir durum için l, s, j kuantum sayıları ne olur?*

$$^3D_2,\ ^4P_{5/2},\ ^2F_{7/2},\ ^3G_3$$

8.12 *Bir s-durumunda ($l = 0$) niçin spin-yörünge etkileşmesi olmadığını açıklayın.*

8.13 *Bir elektronun spin magnetik momenti $\vec{\mu}_S$ ise, hangi spin durumunda $< \mu_{S_z} >= \mu_B$ olur?*

8.14 *Bir alkali atomunda V_{mag} ve V_{L-S} etkileşmelerinin eşit katkıda bulunacağı magnetik alan şiddetinin değerini Bohr magnetonu μ_B ve çekirdek yükü Z cinsinden, yaklaşık olarak hesaplayın.*

8.15 *Bir alkali atomunun $l = 2$ enerji düzeylerinde (a) spin-yörünge etkileşmesinden, (b) kuvvetli Zeeman olayından, (c) zayıf Zeeman olayından dolayı meydana gelen değişiklikleri hesaplayın.*

BÖLÜM 9

SİMETRİ ve DÖNÜŞÜMLER

Bir kuantum sistemin incelenmesi, beraberinde bir koordinat sistemi seçimini gerektirir. Schrödinger denklemine bakalım:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

Bu denklem yazılırken $\vec{r} = (x,y,z)$ konumu belirli bir xyz koordinat sisteminde seçilmiş demektir. Bu koordinat sistemi değiştirilirse (veya, *koordinat dönüşümü* yapılırsa) ne olur? Hamiltonyendeki terimler yeni ifadelerle verileceği için, bunun çözümü olan $\psi(\vec{r}\,')$ dalga fonksiyonu da farklı olacaktır.

Öte yandan, fiziksel büyüklükleri temsil eden operatörler de koordinat seçimine bağlıdırlar (örneğin, L_z, S_z yazarken z-eksenini seçmişiz demektir). Bunlardaki değişmeler özvektörlerde kendini gösterir.

Koordinat sisteminde hangi tür dönüşümler olabilir?

- *Öteleme :* Konum vektörü sabit bir $\vec{a}$ kadar yerdeğiştirir.
- *Dönme :* Konum vektörü bir $\hat{n}$ ekseni etrafında θ açısıyla döner.
- *Yansıma :* Konum vektörü yön değiştirir.

Ayrıca, t zamanını da bir koordinat kabul edersek, *zaman yansıması* denilen $(t \to -t)$ dönüşümü de incelenebilir.

Tüm bu dönüşümlerin hamiltonyen üzerindeki etkisi incelendiğinde bazı simetri özellikleri ortaya çıkabilir. Bu simetrilerin doğurduğu fiziksel sonuçlar bu bölümde kısa olarak incelenecektir. Varacağımız sonuçları baştan kısaca verelim:

- *Bir koordinat dönüşümü altında hamiltonyendeki simetri dalga fonsiyonlarında ve fiziksel büyüklüklerde kendini gösterir.*
- *Her simetriye karşılık gelen korunumlu bir fiziksel büyüklük vardır.*

Aslında, dönüşümler lisansüstü düzeyinde incelenmesi gereken, matematiksel ağırlıklı bir konudur. Biz burada konuya bir giriş ve basit uygulamalarla yetineceğiz.

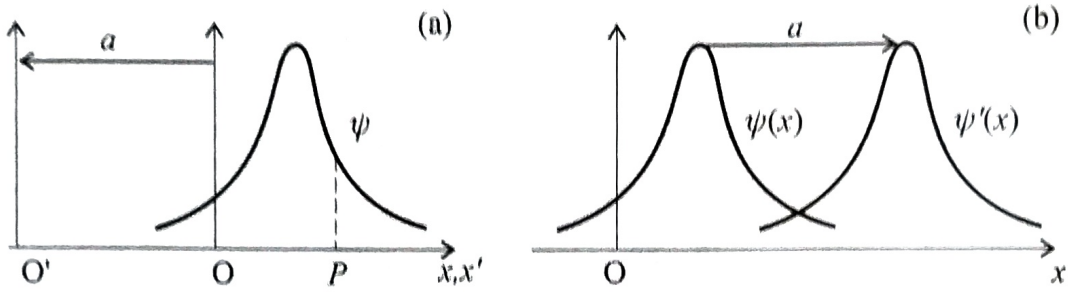
9.1 ÖTELEME. BİRİMSEL DÖNÜŞÜMLER

Bu kısımda koordinat dönüşümlerinin genel özelliklerine varmaya çalışacağız. Konunun genel incelemesi zor olduğundan, öteleme dönüşümünü örnek alıp, buradan elde edilen sonuçları genelleştireceğiz.

9.1.1 ÖTELEME

Tek boyutlu uzayda bir parçacığı ele alalım ve x koordinatındaki öteleme dönüşümünün dalga fonksiyonu $\psi(x)$ üzerindeki etkisini araştıralım.

Önce "pasif" bir dönüşüme bakalım. Yani, S referans sisteminde O orijinine göre x koordinatı varken, yeni bir S' referans sisteminde O' orijini a kadar bir miktar geride olsun (Şekil 9.1a).



Şekil 9.1: Öteleme dönüşümü. (a) pasif, (b) aktif öteleme.

S sistemindeki bir $\psi(x)$ dalga fonksiyonuyla temsil edilen durum yeni sistemde başka bir $\psi(x')$ dalga fonksiyonuyla temsil edilecektir. Ancak, fiziksel bir P noktasında her iki dalga fonksiyonunun aldığı değer aynı olmalıdır:

$$\psi(x) = \psi'(x')$$

Çünkü, bu iki noktanın koordinatları arasında

$$x' = x + a \qquad \text{bağıntısı vardır.}$$

Aynı dönüşüm, "aktif" bir bakış açısıyla da ele alınabilir: Koordinat sistemi aynı kalsın, fakat $\psi(x)$ dalga fonksiyonunu ileri doğru a kadar öteleyelim (Şekil 9.1b). Bu durumda yeni dalga fonksiyonu $\psi'(x)$ ile ifade edilecektir. Bu bakış açısında, eski $(x-a)$ konumundaki fonksiyon değeri şimdi x konumlu yerde olacaktır:

$$\psi'(x) = \psi(x-a)$$

Özetlersek, iki bakış açısı eşdeğerdir:

Pasif		*Aktif*
Koordinat sistemini $-a$ kadar ötelemek	$\equiv$	Dalga fonksiyonunu $+a$ kadar ötelemek

Bu bölümde aktif bakış açısıyla çalışacağız.

Sonsuz Küçük Öteleme

Bir $\psi(x)$ dalga fonksiyonunu $+a$ kadar öteye taşıdığımızda, eski dalga fonksiyonu ile ilişkisinin

$$\psi'(x) = \psi(x-a)$$

olduğunu görmüştük. a ötelemesi sonsuz küçük (infinitezimal) miktarda ise, $\psi(x-a)$ nın Taylor açılımında ilk birkaç terimi almak iyi bir yaklaşım olur. δa kadar bir öteleme için:

$$\begin{aligned}\psi'(x) = \psi(x-\delta a) &\approx \psi(x) - \delta a \frac{d\psi}{dx} + O(\delta a^2) + \cdots \\ &= \left[1 - \delta a \frac{d}{dx}\right] \psi(x)\end{aligned}$$

Parantez içindeki kısmi türevde momentum operatörü $p = -i\hbar(d/dx)$ oluşturulursa

$$\psi'(x) = \left[1 - i\frac{\delta a}{\hbar} p\right] \psi(x)$$

olur. O halde, öteleme işlemini gerçekleştiren bir $\mathscr{T}$ operatörünü şöyle tanımlayabiliriz:

$$\begin{aligned}\mathscr{T}(\delta a) &= 1 - i\frac{\delta a}{\hbar} p \\ \psi'(x) &= \mathscr{T}(\delta a)\, \psi(x)\end{aligned} \tag{9.1}$$

Sonlu Öteleme

Her sonlu öteleme, N sayıda sonsuz küçük ötelemenin ard arda uygulanması şeklinde düşünülebilir. Buna göre, $a = N\ \delta a$ alınırsa

$$\begin{aligned}\psi'(x) &= \lim_{N\to\infty} \left[1 - \frac{i}{\hbar}\delta a\, p\right]^N \psi(x) = \lim_{N\to\infty} \left[1 - \frac{i}{\hbar}\frac{ap}{N}\right]^N \psi(x) \\ &= \mathrm{e}^{-iap/\hbar}\, \psi(x)\end{aligned}$$

olur. O halde, sonlu öteleme operatörü şöyle yazılabilir:

$$\mathscr{T} = \mathrm{e}^{-iap/\hbar} \tag{9.2}$$

3-boyutlu Öteleme

Yukardaki formalizm kolayca üç boyuta taşınabilir. $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$ ile belirlenen bir öteleme için, Taylor açılımında kısmi türevler kullanılır:

$$\begin{aligned}\psi'(\vec{r}) &= \psi(\vec{r} - \vec{a}) = \psi(x - a_x, y - a_y, z - a_z) \\ &\approx \psi(x,y,z) - a_x\frac{\partial\psi}{\partial x} - a_y\frac{\partial\psi}{\partial y} - a_z\frac{\partial\psi}{\partial z} \\ &= \left[1 - \left(a_x\frac{\partial}{\partial x} + a_y\frac{\partial}{\partial y} + a_z\frac{\partial}{\partial z}\right)\right] \psi(x,y,z) \\ &= [1 - \vec{a}.\vec{\nabla}]\, \psi(\vec{r})\end{aligned}$$

3-boyutlu uzayda momentum operatörü $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ olduğundan, sonuç olarak sonlu öteleme operatörü doğrudan yazılabilir:

$$\psi'(\vec{r}) = e^{-i\vec{a}.\vec{p}/\hbar}\,\psi(\vec{r})$$

Ötelemeyi tersine çeviren invers operatörü $\mathcal{T}^{-1}$ ile gösterirsek

$$\psi(x) = \mathcal{T}^{-1}(a)\psi'(x)$$

olmalıdır. Yine Taylor açılımı yoluyla işlemler yapılırsa

$$\mathcal{T}^{-1}(a) = e^{+iap/\hbar}$$

ve $\mathcal{T}^{-1}\mathcal{T} = 1$ olduğu gösterilebilir.

Şimdi, $\mathcal{T}$ operatörünün hermitik eşleniği $\mathcal{T}^\dagger$ yi arayalım. Hermitik eşlenik alınırken kompleks sayıların eşleniği ve operatörlerin hermitik eşleniği alınıyordu. Momentum operatörü hermitik olduğundan

$$\begin{aligned}\mathcal{T}(a)^\dagger &= \left[e^{-iap/\hbar}\right]^\dagger \\ &= e^{+iap/\hbar}\end{aligned}$$

bulunur. Bu sonuca göre, öteleme operatörünün inversi ve hermitik eşleniği aynıdır:

$$\mathcal{T}^\dagger = \mathcal{T}^{-1}$$

Matematikte, bu özelliği taşıyan operatöre *birimsel (üniter) operatör* adı verilir.

Dinamik Değişkenlerin Dönüşümleri

Bir fiziksel büyüklüğü $(\vec{r}, \vec{p}, \vec{L}, \ldots)$ temsil eden operatörü A ile gösterirsek, bunun $|\psi\rangle$ durumundaki beklenen değeri $\langle\psi|A|\psi\rangle$ ile veriliyordu. Bu durum bir $\mathcal{T}(a)$ operatörüyle ötelenirse

$$|\psi'\rangle = \mathcal{T}(a)|\psi\rangle$$

olur. Aynı dönüşüm sırasında A operatörü de A' ye dönüşüyor olsun.

Bir fiziksel büyüklüğün beklenen değeri, koordinat dönüşümünden niçin etkilensin? Elbette aynı kalmak zorundadır. O halde, yeni durumdaki yeni operatörün beklenen değeri, eski değere eşit olmalıdır:

$$\langle\psi'|A'|\psi'\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

Dalga fonksiyonu için $\mathcal{T}$ dönüşümü yazılırsa

$$\langle\psi|\mathcal{T}^\dagger A'\mathcal{T}|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

olur. Bu eşitliğin keyfi her dalga fonksiyonu için geçerli olması gerekir. Buradan, fiziksel büyüklüğü temsil eden operatörün dönüşüm kuralı yazılabilir:

$$\mathcal{T}^\dagger A'\mathcal{T} = A \qquad \text{veya} \qquad A' = \mathcal{T}A\mathcal{T}^\dagger$$

Eğer, A operatörü p momentumu ile sıra değiştirme özelliğine sahipse, üstel fonksiyonun Taylor açılımındaki herbir terimle de sıra değiştirir ve $A' = A$ olur:

$$A' = \mathcal{T}A\mathcal{T}^\dagger = A\mathcal{T}\mathcal{T}^\dagger = A\mathcal{T}\mathcal{T}^{-1} = A \qquad ([A,p] = 0 \text{ ise}) \qquad (9.2)$$

Alıştırma 9.1 : Konum, momentum, yörünge açısal momentumu ve spin operatörlerinin öteleme dönüşümü altındaki yeni ifadeleri ne olur:

Çözüm : Momentum operatörü kendisiyle sıra değiştirdiği için $p' = p$ olur. Veya, öteleme dönüşümü momentumu etkilemez.

Benzer şekilde, $[\vec{s}, p] = 0$ olduğundan, spin operatörü de aynı kalır.

Konum operatörü $[x, p] = i\hbar$ bağıntısını sağladığından

$$x' = e^{-iap/\hbar}\, x\, e^{iap/\hbar}$$

değerini hesaplayalım. Burada, sonsuz küçük dönüşüm kullanmak sonucu değiştirmez, kolaylık sağlar:

$$\begin{aligned} x' &= \left(1 - \frac{iap}{\hbar}\right) x \left(1 + \frac{iap}{\hbar}\right) \\ &= x - \frac{i}{\hbar} apx + \frac{i}{\hbar} axp + O(a^2) \\ &= x + \frac{i}{\hbar} a[x, p] \\ x' &= x - a \end{aligned}$$

(sonsuz küçük öteleme için a^2 terimi ihmal edilebilir). Bu sonuç, dalga fonksiyonunu $+a$ kadar öteleyen dönüşümün konum operatörünü $-a$ kadar ötelediğini gösterir. Bu sonuç, şaşırtıcı görünse de doğrudur, çünkü aktif ve pasif öteleme arasındaki ilişkinin başka türlü bir ifadesidir: dalga fonksiyonunu $+a$ kadar ötelemekle $x - a$ daki konum değerini kullanmak aynı şeydir.

Yörünge açısal momentumu için $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ tanımını kullanarak hesabı üç boyutta yapalım:

$$\begin{aligned} \vec{L}' &= \left(1 - \frac{i}{\hbar}\vec{a}.\vec{p}\right) \vec{r} \times \vec{p} \left(1 + \frac{i}{\hbar}\vec{a}.\vec{p}\right) \\ &= \vec{r} \times \vec{p} - \frac{i}{\hbar}\left[\vec{a}.\vec{p}, \vec{r} \times \vec{p}\right] + O(a^2) \end{aligned}$$

Bu vektör eşitliğin sadece x bileşenini hesaplayıp diğer bileşenleri tahmin edebiliriz. Sağ taraftaki vektörel çarpımların x bileşeni açık yazılırsa

$$\begin{aligned} [p_i, x_j] &= -i\hbar\, \delta_{ij} \qquad (i, j = x, y, z) \text{ olduğundan} \\ L'_x &= (yp_z - zp_y) + \frac{i}{\hbar}[a_x p_x + a_y p_y + a_z p_z,\ yp_z - zp_y] \\ &= (yp_z - zp_y) - (a_y p_z - a_z p_y) \end{aligned}$$

bulunur. Bu eşitliğin üç boyutlu karşılığı doğrudan yazılabilir:

$$\vec{L}' = \vec{r} \times \vec{p} - \vec{a} \times \vec{p} = \vec{L} - \vec{a} \times \vec{p}$$

9.1.2 DÖNÜŞÜMLERİN GENEL ÖZELLİKLERİ

Yukarda öteleme örneğinde pratik kazandıktan sonra, dönüşümlerin genel formalizmini ispatsız sıralayalım:

- Her koordinat dönüşümü bir α parametresine bağlı olarak $U(\alpha)$ şeklinde tanımlanır (α = öteleme uzunluğu, dönme açısı,... olabilir).
- α parametresinin sonsuz küçük olduğu durumda her dönüşüm

$$U(\delta\alpha) = 1 - i\delta\alpha\hat{G} \tag{9.4}$$

olarak yazılabilir. Buradaki $\hat{G}$ operatörü *hermitik* olmalıdır ve dönüşümün *üretici operatörü* adını alır. Her dönüşümün bir üretici operatörü vardır. Yukardaki sonuca göre öteleme dönüşümünün *üretici operatörü* p momentumudur.

- Her dönüşüm birimsel bir operatörle temsil edilir (operatörün tersi hermitik eşleniğiyle aynıdır):

$$U^{-1} = U^{\dagger} \qquad \text{veya} \qquad U^{\dagger}U = 1 \tag{9.5}$$

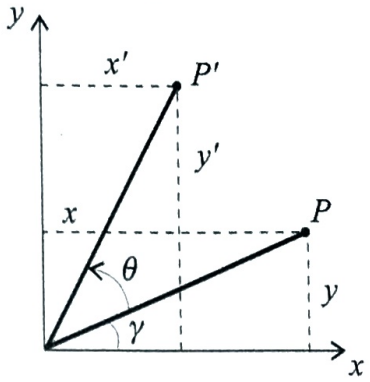
Dönüşüm operatörünün dalga fonksiyonuna ve operatörlere etkisi

$$\boxed{\psi' = U\psi \qquad A' = UAU^{\dagger}} \tag{9.6}$$

olarak hesaplanır.

9.2 DÖNME

İkinci dönüşüm olarak dönme operasyonunu inceleyelim. Yine aktif dönüşüm çerçevesinde, koordinat sistemini sabit tutup sistemi döndürelim. Önce, kolaylık olmak üzere, z-ekseni etrafında θ açısı kadar bir dönmeyi ele alalım. x-y düzlemindeki bir P noktası başlangıçta x-ekseniyle γ açısı yapıyorken, dönme sonucu $(\gamma+\theta)$ açısı yapan bir P' noktasına gelecektir (Şekil 9.2).



Şekil 9.2:

O halde, bu noktanın eski ve yeni konumu arasındaki bağıntıları şöyle yazabiliriz:

$$\begin{aligned} x' &= r\cos(\gamma+\theta) = r\cos\gamma\cos\theta - r\sin\gamma\sin\theta \\ y' &= r\sin(\gamma+\theta) = r\sin\gamma\cos\theta + r\cos\gamma\sin\theta \\ z' &= z \end{aligned}$$

Eski koordinatlar $x = r\cos\gamma$ ve $y = r\sin\gamma$ olarak yazılırsa

$$\begin{aligned} x' &= x\cos\theta - y\sin\theta \\ y' &= x\sin\theta + y\cos\theta \\ z' &= z \end{aligned}$$

olur. Bu dönüşümü sağlayan operatöre $\mathscr{R}(\theta)$ dersek, bunu bir matris şeklinde yazabiliriz:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathscr{R}(\theta)} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \vec{r}\,' = \mathscr{R}(\theta)\,\vec{r}$$

Bu matrisin determinantının 1 olduğu kontrol edilebilir. Bu özellik, dönüşüm sırasında normların değişmeyeceği anlamına gelir.

$\vec{r}\,'$ noktasını $\vec{r}$ ye geri getiren invers operatör

$$\vec{r} = \mathscr{R}^{-1}(\theta)\,\vec{r}\,' \tag{9.7}$$

olur.

Sonsuz küçük dönme

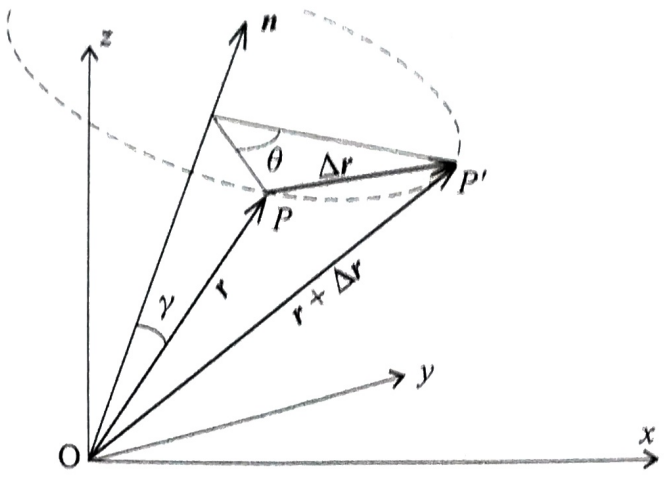
θ açısı sonsuz küçük ise, yukardaki bağıntılarda $\cos\theta \approx 1$ ve $\sin\theta \approx \theta$ alınabilir ve

$$\begin{aligned} x' &= x - \theta\, y \\ y' &= y + \theta\, x \\ z' &= z \end{aligned}$$

olur. Dönme açısını bir vektör olarak $\vec{\theta} = (0,0,\theta) = \theta\hat{k}$ şeklinde yazarsak, $\Delta\vec{r} = \vec{r}\,' - \vec{r}$ yerdeğiştirmesi

$$\Delta\vec{r} = \vec{\theta} \times \vec{r} \quad \text{veya} \quad \vec{r}\,' = \vec{r} + \vec{\theta} \times \vec{r}$$

olarak yazılabilir. Burada $\vec{\theta}$ vektörü dönme eksenini ve dönme açısını aynı anda belirtebilen bir vektör olarak tanımlanmıştır.



Şekil 9.3: $\hat{n}$ ekseni etrafında θ açısı kadar dönme.

Genelleme

3-boyutlu uzayda $\hat{n} = (n_x, n_y, n_z)$ doğrultusundaki bir eksen etrafında sonsuz küçük θ açısı kadar dönme için yine $\Delta\vec{r} = \vec{r}\,' - \vec{r}$ tanımlarsak (Şekil 9.3), bunun büyüklüğü

$$\Delta r = (r\sin\gamma)\,\theta = r\theta\sin\gamma$$

olur (burada γ açısı P doğrultusunun $\hat{n}$ ekseniyle yaptığı açıdır). Bu $\Delta\vec{r}$ hem $\hat{n}$ ve hem de $\vec{r}$ doğrultusuna dik olduğu için

$$\Delta\vec{r} = \theta\,\hat{n}\times\vec{r}$$

yazılabilir. Yine $\vec{\theta} = \theta\,\hat{n}$ vektörü tanımlanırsa

$$\Delta\vec{r} = \vec{\theta}\times\vec{r}$$

olur. O halde, sonsuz küçük dönmenin en genel ifadesi

$$\vec{r}\,' = \mathscr{R}(\theta)\,\vec{r} = \vec{r} + \Delta\vec{r} = \vec{r} + \vec{\theta}\times\vec{r} \quad \text{olur.}$$

9.2.1 SPİNSİZ BİR PARÇACIĞIN DÖNMESİ

İç serbestlik derecesi olmayan (yani, spinsiz) bir parçacığın durumu sadece $\psi(\vec{r})$ dalga fonksiyonuyla belirlenir. $\hat{n}$ ekseni etrafında bir $\mathscr{R}(\theta)$ dönmesi sonucu bu dalga fonksiyonu ne olur?

Dönme sonucu, $\vec{r}$ konumlu bir yerdeki yeni dalga fonksiyonu eski $\vec{r} - \Delta\vec{r}$ konumlu yerden buraya gelmiş demektir. Buna göre,

$$\psi'(\vec{r}) = \mathscr{R}(\theta)\,\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \Delta\vec{r}) = \psi(\mathscr{R}^{-1}\vec{r})$$

olmalıdır. Yukarda $\Delta\vec{r}$ için bulunan ifade Taylor açılımında kullanılır ve $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ yazılırsa

$$\begin{aligned}\psi'(\vec{r}) &= \psi(\vec{r}-\Delta\vec{r}) \\ &= \psi(\vec{r})-\Delta\vec{r}.\vec{\nabla}\psi(\vec{r}) \\ &= (1-\frac{i}{\hbar}\Delta\vec{r}.\vec{p})\psi(\vec{r}) \\ &= \{1-\frac{i}{\hbar}(\vec{\theta}\times\vec{r}).\vec{p}\}\psi(\vec{r})\end{aligned}$$

olur. Karışık çarpım için

$$(\vec{\theta}\times\vec{r}).\vec{p}=\vec{\theta}.(\vec{r}\times\vec{p})$$

eşitliği kullandığında $\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$ açısal momentumu ifadesi oluşur. Buna göre

$$\begin{aligned}\psi'(\vec{r}) &= \left[1-\frac{i}{\hbar}\vec{\theta}.\vec{L}\right]\psi(\vec{r}) \qquad (9.8)\\ \mathscr{R}(\theta) &= 1-\frac{i}{\hbar}\vec{\theta}.\vec{L}\end{aligned}$$

olur. Bu sonuç, dönmenin üretici operatörünün açısal momentum L olduğunu gösterir.

Bu sonuca göre sonlu dönme operatörü doğrudan yazılabilir:

$$\mathscr{R}(\theta)=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\theta}.\vec{L}} \qquad (9.9)$$

Spinli bir parçacık için dönme operatöründe $\vec{L}$ yerine $\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$ kullanılır.

Dinamik Değişkenlerin Dönmesi

Bir A operatörünün U dönüşümü altında $A'=UAU^{\dagger}$ olduğunu görmüştük. Bu işlem sonsuz küçük dönme için uygulanırsa

$$\begin{aligned}\mathscr{R}(\theta) &= 1-\frac{i}{\hbar}\vec{\theta}.\vec{L} \\ \mathscr{R}^{\dagger}(\theta) &= 1+\frac{i}{\hbar}\vec{\theta}.\vec{L} \\ A' &= \left(1-\frac{i}{\hbar}\vec{\theta}.\vec{L}\right)A\left(1+\frac{i}{\hbar}\vec{\theta}.\vec{L}\right)=A-\frac{i}{\hbar}\left[\vec{\theta}.\vec{L},\,A\right]\end{aligned}$$

bulunur. Bu sonuca göre, bir operatörün dönme sonucu aynı kalabilmesi için, açısal momentumun dönme ekseni doğrultusundaki bileşeniyle sıra değiştirmesi yeterlidir.

9.2.2 SPİN UZAYINDA DÖNME

Koordinat uzayındaki dönmeye benzeterek, spini $\frac{1}{2}$ olan bir parçacık için iki boyutlu spin uzayındaki dönme operatörü

$$U_S(\theta)=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}.\vec{S}}=\mathrm{e}^{-\frac{i}{2}\theta\hat{n}.\vec{\sigma}} \qquad (9.10)$$

olur ($\vec{S}=\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ alındı). Pauli spin matrislerinin $\sigma_i^2=1$ özelliği kullanılarak

$$\mathrm{e}^{-i\frac{\theta}{2}\hat{n}.\vec{\sigma}}=\cos\frac{\theta}{2}-i\sin\frac{\theta}{2}\,\hat{n}.\vec{\sigma} \qquad (9.11)$$

olduğu gösterilebilir.

Bu uzayda iki bileşenli bir dalga fonksiyonu

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (a^2 + b^2 = 1)$$

gözönüne alınırsa, bir $\hat{n}$ ekseni etrafında θ açısı kadar dönme sonucu yeni dalga fonksiyonu

$$|\chi'\rangle = (\cos\tfrac{\theta}{2} - i \sin\tfrac{\theta}{2}\, \hat{n}.\vec{\sigma})|\chi\rangle$$

olur.

Koordinat uzayı ile spin uzayındaki dönmeler arasında ilginç bir farklılık vardır: Koordinat uzayında 2π radyanlık bir dönme sonucu eski dalga fonksiyonunu tekrar elde ederiz. Ancak, yukardaki $|\chi'\rangle$ ifadesinde örneğin z-ekseni etrafında $\theta = 2\pi$ kadar bir dönme seçilirse

$$\begin{aligned} \cos\pi &= -1 \qquad \sin\pi = 0 \\ |\chi'\rangle &= -|\chi\rangle \end{aligned}$$

bulunur, yani spin uzayında 2π kadar bir dönüş sonucu dalga fonksiyonu işaret değiştirir.

Alıştırma 9.2: *$l = 1$ yörüngesinde spinsiz bir parçacığın durumu*

$$\psi(\vec{r}) = R(r)\,[Y_1^1 - 2Y_1^0 + 3Y_1^{-1}]$$

olarak veriliyor. (a) Bir ölçme sonucu açısal momentumun L_z bileşenini $-\hbar$ bulma olasılığı nedir? (b) Bu sistemi z-ekseni etrafında $\theta = \pi/3$ kadar döndürün ve dalga fonksiyonunu bulun. Bu kez aynı olasılık ne olur? (c) x-ekseni etrafında $\theta = \pi/3$ lük dönüş için aynı hesabı tekrarlayın.

Çözüm : Dalga fonksiyonunun radyal kısmını bırakıp açısal kısmıyla çalışabiliriz:

$$|\psi\rangle = Y_1^1 - 2Y_1^0 + 3Y_1^{-1} = |1\ 1\rangle - 2|1\ 0\rangle + 3|1{-1}\rangle$$

yazılırsa, normlama

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1^2 + (-2)^2 + 3^2 = 14$$

olur. Buna göre, L_z nin $-\hbar$ bulunma olasılığı, Y_1^{-1} in katsayısı ile belirlenir:

$$P(m = -1) = \frac{3^2}{14} = 0.64$$

(b) z-ekseni etrafındaki dönme için

$$\vec{\theta}.\vec{L} = \theta L_z = \frac{\pi}{3} L_z$$

olur. Bu operatörün $|1\ m\rangle$ özvektörlerine etkisini biliyoruz:

$$L_z|1\ m\rangle = m\hbar|1\ m\rangle$$

Üstel operatörün etkisi sonucu L_z yerine doğrudan $m\hbar$ yazabiliriz:

$$\begin{aligned}|\psi'\rangle &= \mathscr{R}\,|\psi\rangle \\ &= e^{-\frac{i\pi}{3\hbar}L_z}\left[|1\ 1\rangle - 2|1\ 0\rangle + 3|1{-1}\rangle\right] \\ &= e^{-\frac{i\pi}{3}}|1\ 1\rangle - 2e^{0}|1\ 0\rangle + 3e^{+\frac{i\pi}{3}}|1{-1}\rangle \\ &= \frac{1-\sqrt{3}i}{2}|1\ 1\rangle - 2|1\ 0\rangle + 3\frac{1+\sqrt{3}i}{2}|1{-1}\rangle\end{aligned}$$

Yine, Y_1^{-1} in katsayısının mutlak değer karesi norma bölünürse aynı olasılık değeri (0.64) bulunur. Bu sonucu baştan da görebilirdik, çünkü z-ekseni etrafındaki dönmelerde vektörlerin z-bileşeni değişmez.

(c) Bu kez x ekseni etrafında dönme operatörü

$$U(\theta) = e^{-\frac{i\pi}{3\hbar}L_x}$$

olur. Bölüm 8 de L_x operatörünün $|l\ m\rangle$ vektörlerine etkisi hesaplanmıştı. L_x in matris temsili veya basamak operatörleri cinsinden $L_x = (L_+ + L_-)/2$ yazılımı kullanılarak hesaplama sonucu:

$$\begin{aligned}L_x|1\ 1\rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\,|1\ 0\rangle \\ L_x|1\ 0\rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\,\{|1\ 1\rangle + |1{-1}\rangle\} \\ L_x|1{-1}\rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\,|1\ 0\rangle\end{aligned}$$

olduğu gösterilebilir. Bu operatörü üstel fonksiyonda kullanırken, $\hbar/\sqrt{2}$ faktörlerini üstel fonksiyona geçirmek yeterlidir:

$$\begin{aligned}|\psi'\rangle &= e^{-\frac{i\pi}{3\hbar}L_x}\left[|1\ 1\rangle - 2|1\ 0\rangle + 3|1{-1}\rangle\right] \\ &= e^{-\frac{i\pi}{3\sqrt{2}}}|1\ 0\rangle - 2e^{-\frac{i\pi}{3\sqrt{2}}}(|1\ 1\rangle + |1{-1}\rangle) + 3e^{-\frac{i\pi}{3\sqrt{2}}}|1\ 0\rangle \\ &= e^{-\frac{i\pi}{3\sqrt{2}}}\left[-2|1\ 1\rangle + 4|1\ 0\rangle - 2|1{-1}\rangle\right]\end{aligned}$$

bulunur. Bu vektörün normu 24 olur. L_z nin $-\hbar$ bulunma olasılığı bu kez

$$P(m=-1) = \frac{(-2)^2}{24} = 0.17 \qquad \text{olur.}$$

Alıştırma 9.3: (a) Konum ve momentum vektörlerinin sonsuz küçük dönme altında nasıl değiştiğini bulun. (b) Bu vektörlerin mutlak değerlerinin değişmediğini gösterin.

Çözüm : Operatörlerin dönme operasyonu için bulunan

$$A' = A - \frac{i}{\hbar}\,[\vec{\theta}.\vec{L},\, A]$$

ifadesinde A yerine sırasıyla $\vec{r}$ ve $\vec{p}$ alınırsa

$$\vec{r}' = \vec{r} - \frac{i}{\hbar}[\vec{\theta}.\vec{L}, \vec{r}]$$
$$\vec{p}' = \vec{p} - \frac{i}{\hbar}[\vec{\theta}.\vec{L}, \vec{p}]$$

Buradaki sıra değiştirme bağıntıları bilinen yolla hesaplanırsa sonuçlar

$$[\vec{\theta}.\vec{L}, \vec{r}] = -i\hbar\,\vec{\theta}\times\vec{r}$$
$$[\vec{\theta}.\vec{L}, \vec{p}] = -i\hbar\,\vec{\theta}\times\vec{p}$$

bulunur. Buna göre

$$\vec{r}' = \vec{r} - \vec{\theta}\times\vec{r} \quad \vec{p}' = \vec{p} - \vec{\theta}\times\vec{p} \quad \text{olur.}$$

(b) Dönme sonucu $\vec{r}$ ve $\vec{p}$ vektörlerinin bileşenleri değişse bile mutlak değerleri değişmemelidir. Gerçekten de

$$\begin{aligned} r'^2 &= \vec{r}'.\vec{r}' = (\vec{r} - \vec{\theta}\times\vec{r}).(\vec{r} - \vec{\theta}\times\vec{r}) \\ &= r^2 - 2\vec{r}.(\vec{\theta}\times\vec{r}) + O(\theta^2) \\ &= r^2 \end{aligned}$$

olur (karışık çarpım sıfırdır ve θ^2 li terim ihmal edilir). Momentum için de $p'^2 = p^2$ olduğu aynı yolla gösterilir.

Alıştırma 9.4: *Bir elektronun spin z-bileşeni ölçüldüğünde $-\hbar/2$ değeri bulunmuştur. z-ekseniyle θ açısı yapan bir doğrultuda ikinci bir ölçme yapılıyor. Spin z-bileşenini $+\hbar/2$ bulma olasılığı nedir?*

Çözüm : Bu tür problemleri daha önce başka yöntemle çözmüştük. Dönme operatörü kullanılırsa çözüm daha kolay olur. Sistemin ilk durumu

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

olarak verilmiştir. Şimdi, yeni z-eksenini bu θ doğrultusunda seçersek sistemi $-\theta$ kadar dönmüş varsayabiliriz. Buna göre, yeni dalga fonksiyonu (σ_z nin matris temsili de yazılırsa)

$$\begin{aligned} |\chi'\rangle &= (\cos\tfrac{\theta}{2} + i\sin\tfrac{\theta}{2}\,\sigma_z)|\chi\rangle \\ &= \left[\cos\tfrac{\theta}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + i\sin\tfrac{\theta}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= i\sin\tfrac{\theta}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \cos\tfrac{\theta}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

bulunur. Herbir özvektörün katsayısının mutlak değer karesi olasılıkları verir. O halde, cevap $\sin^2\frac{\theta}{2}$ olur.

9.3 YANSIMA

Uzay yansıması bir $\psi(\vec{r})$ dalga fonksiyonunu $\psi(-\vec{r})$ ye çevirir. Burada hemen vurgulayalım: Yansıma π radyan kadar bir dönme değildir. Yansıma sonucu bir cisim hem döner ve hem de (aynada olduğu gibi) sağ-sol yer değiştirir. Noktasal ve spinsiz bir parçacık için gerçekten π kadar dönme ile aynı sonucu verir. Burada aktif veya pasif dönüşüm arasında bir fark yoktur.

$\vec{r}\,' = -\vec{r}$ dönüşümünü sağlayan operatörün matris temsilini arayalım.

$$\begin{aligned} x' &= -x \\ y' &= -y \\ z' &= -z \end{aligned}$$

olduğuna göre

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Yansıma operatörü U_I ile gösterilirse

$$\vec{r}\,' = U_I\,\vec{r} \qquad U_I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{9.12}$$

olur. Bu operatör için $\det U_I = -1$ olduğu açıktır. Bu özelliğinden dolayı, yansıma operatörünün klasik bir karşılığı yoktur, yani $(\vec{r},\vec{p})$ operatörleri cinsinden yazılamaz.

Yansıma Operatörünün Özdeğerleri

U_I operatörünün özvektörleri olan $\psi(\vec{r})$ fonksiyonlarını ve λ özvektörlerini arayalım:

$$U_I\psi(\vec{r}) = \lambda\,\psi(\vec{r})$$

Yansıma operatörünün etkisi $(\vec{r} \to -\vec{r})$ olduğundan, ardarda iki kez etkidiğinde tekrar $\vec{r}$ vektörünü bulmalıyız. O halde, bu eşitliğe bir kez daha U_I ile etki edilirse

$$\begin{aligned} U_I^2\psi(\vec{r}) &= \lambda U_I\psi(r) \\ \psi(\vec{r}) &= \lambda^2\psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

olmalıdır. Buradan

$$\lambda^2 = 1 \qquad \text{ve} \qquad \lambda = \pm 1$$

olduğu görülür. Bu sonuca göre

$$\begin{aligned} U_I\psi(\vec{r}) &= \lambda\,\psi(\vec{r}) \\ \psi(-\vec{r}) &= \pm\psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

olan *tek ve çift fonksiyonlar* yansıma operatörünün özfonksiyonları olurlar. Bu sonuç, daha önce incelediğimiz parite operatörünün fiziksel anlamının uzay yansıması olduğunu gösterir.

Dinamik değişkenlerin Yansıması

$A' = UAU^{\dagger}$ kuralını uygularsak

$$\vec{r}\,' = U_I\,\vec{r}\,U_I^{\dagger} = -\vec{r} \tag{9.13}$$

olduğu açıktır. Diğer operatörler için bu sonucu kullanabiliriz. Momentum operatörü için

$$\begin{aligned}
\vec{p} &= -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) \\
\vec{p}\,' &= -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial(-x)}, \frac{\partial}{\partial(-y)}, \frac{\partial}{\partial(-z)}\right) \\
\vec{p}\,' &= -\vec{p}
\end{aligned}$$

bulunur. Bu iki vektörün işaret değiştirdiğini gördükten sonra açısal momentumu ele alırsak

$$\begin{aligned}
\vec{L}' &= \vec{r}\,' \times \vec{p}\,' = (-\vec{r}\,') \times (-\vec{p}\,') = \vec{r} \times \vec{p} \\
\vec{L}' &= \vec{L}
\end{aligned}$$

bulunur. Yansımadaki bu farklılık kuantum mekaniğindeki operatörlerin yeni bir tür sınıflandırılmasına yol açar:

- $(\vec{r}, \vec{p})$ gibi yansıma sonucu işaret değiştiren vektörlere *kutupsal vektör* denir.
- Bir vektörel çarpım olarak tanımlanan $(\vec{L}, \vec{S})$ gibi vektörler ise yansıma sonucu işaret değiştirmezler. Bunlara da *eksenel vektör* adı verilir.
- Benzer şekilde, $(r^2, \vec{r}.\vec{p}, \vec{L}^2)$ gibi işaret değiştirmeyen operatörler *skaler* olurlar.
- $(\vec{r}.\vec{L}, \vec{\sigma}.\vec{p})$ gibi yansıma sonucu işaret değiştiren skaler operatörlere ise *zahiri (pseudo) skaler* denir.

Elemanter parçacıklar arasındaki etkileşmeler incelenirken, bir takım fiziksel argümanlar sonucu, bu terimlerden hangilerinin hamiltonyende yer alabileceği saptanır ve işlemlerde kolaylık sağlanır. Bu konuya simetri kısmında değineceğiz.

9.4 SİMETRİ ve KORUNUM YASALARI

Sonsuz küçük bir U dönüşümü için en genel ifadeye tekrar dönelim:

$$U(\alpha) = 1 - i\alpha G$$

Burada G, dönüşümün üretici operatörü olur.

Bir sistemin hamiltonyen operatörü H ile dönüşümün üretici operatörü sıra değiştiriyorsa, dönüşüm sonucu hamiltonyen aynı kalır:

$$\begin{aligned} [H,G] &= 0 \quad \text{ise} \\ H' &= U H U^{\dagger} = (1 - i\alpha G) H (1 + i\alpha G) = H + i\alpha [G,H] + O(\alpha^2) \\ H' &= H \end{aligned}$$

Başka bir deyişle, U dönüşümü altında sistemin hamiltonyeni simetriktir. Bu durumda, G operatörünün temsil ettiği fiziksel büyüklük *korunumludur* veya *bir hareket sabitidir* denir. Bu genel sonuç şöyle ifade edilebilir:

Bir kuantum sisteminin hamiltonyeni bir dönüşüm altında simetrik ise, bu dönüşümle ilgili korunumlu bir fiziksel büyüklük veya bir hareket sabiti vardır. Burada şu noktaya dikkat edelim: Elbette, hamiltonyenle sıra değiştiren her büyüklük bir hareket sabitidir; bunu Bölüm 5 de görmüştük. Burada önemli olan, dönüşümü karakterize eden operatörün hamiltonyenle sıra değiştirmesi, dolayısıyla dönüşümün korunum yasalarıyla ilişkisidir.

Simetri ve Katlılık

Her simetri operasyonu beraberinde bir katlılık getirir. Bunu görmek için, hamiltonyenin özdeğer problemine bakalım:

$$H\,|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

H hamiltonyenini simetrik bırakan bir U dönüşümü bu denkleme uygulanırsa, ($H = UHU^{\dagger}$ veya $UH = HU$ olduğundan)

$$\begin{aligned} UH\,|\psi_n\rangle &= E_n U|\psi_n\rangle \\ H\,[U|\psi_n\rangle] &= E_n\,[U|\psi_n\rangle] \end{aligned}$$

Bu ifade, $|\psi_n\rangle$ vektörü gibi $U|\psi_n\rangle$ vektörünün de aynı özdeğere karşılık gelen bir özvektör olduğunu gösteriyor. O halde, bu enerji özdeğeri katlı olur.

Buraya kadar incelediğimiz dönüşümler simetri açısından ele alınırsa:

Öteleme Simetrisi

Öteleme için $\mathcal{T} = 1 - (i/\hbar)a.p$ olup üretici operatör p dir. $[H,p] = 0$ olabilmesi için hamiltonyen operatörü

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

r konumundan bağımsız ($V(r) = 0$, veya sabit) olmalıdır. Bu durumda hamiltonyeninin çözümü düzlem dalgadır:

$$H = \frac{p^2}{2m}, \qquad \psi(\vec{r}) = e^{i\vec{p}.\vec{r}/\hbar}$$

Aynı $E = p^2/2m$ özdeğeri için

$$\psi = e^{+i\vec{p}.\vec{r}}, \qquad \psi = e^{-i\vec{p}.\vec{r}}$$

gibi iki düzlem dalga karşılık geldiğinden, serbest parçacık enerjileri iki kez katlı olurlar.

Dönme Simetrisi

$\mathscr{R}(\theta) = 1 - i\theta(\hat{n}.\vec{L})$ dönme operatörünün her $\hat{n}$ ekseni etrafında hamiltonyeni simetrik bırakabilmesi için (bu $\hat{n}$ ekseni x-,y- veya z- eksenleri olabilir) $[H, L_x] = [H, L_y] = [H, L_z] = 0$ olmalıdır. Buna göre $\vec{L}$ açısal momentumu bir hareket sabiti olur.

Enerji özdeğerleri $\{H, L^2, L_z\}$ operatörlerinin ortak özvektörleri seçilirse

$$\psi_{nlm} = R_n Y_l^m$$

olup bu özvektörler $(2l+1)$ kez katlıdırlar.

Yansıma Simetrisi

Yansıma operatörü U_I için $U_I H U_I^{\dagger} = H$ oluyorsa bunun anlamı H ile U_I ortak özvektörlere sahiptirler demektir. Her tek veya çift fonksiyonun yansıma operatörünün özvektörü olduğunu ve buna *parite* dendiğini görmüştük. O halde, hamiltonyen yansıma altında simetrik ise, enerji özfonksiyonları tek veya çift pariteye sahip olurlar ve sistemin paritesi bir hareket sabiti olur.

Klasik fizikten bilinen tüm fiziksel büyüklüklerin bir paritesi vardır. Yansıma altındaki davranışlarına göre, örneğin sıcaklık, elektrik yükü, elektrik alan,... çift pariteli, buna karşılık kuvvet, momentum, elektrik alan,... tek pariteli olurlar. (Bu geometrik pariteye ek olarak, elemanter parçacıkların bir de *iç paritesi* olur ki bu konumuz dışındadır).

Alıştırma 9.5: *Aşağıda verilen hamiltonyenin öteleme, dönme ve yansıma dönüşümleri altında simetrik olup olmadığını, hangi terimlerin hangi simetriyi bozduğunu araştırın:*

$$H = \frac{p^2}{2m} + \vec{p}.\vec{r} + \vec{\sigma}.\vec{p} + \vec{\sigma}.\vec{L} + \vec{p}.\vec{B} + \vec{r}.\vec{E}$$

(buradaki $\vec{B}$ magnetik alanın tek pariteli, $\vec{E}$ elektrik alanın da çift pariteli olduğu veriliyor.)

Çözüm: Bu hamiltonyen, $\vec{r}$ li terimlerden dolayı öteleme simetrisine sahip değildir. Yansıma altında ise, $\vec{r}$, $\vec{p}$ ve $\vec{B}$ işaret değiştirir, $\vec{L}$, $\vec{\sigma}$ ve $\vec{E}$ aynı kalırlar. Buna göre $\vec{\sigma}.\vec{p}$ ve $\vec{r}.\vec{E}$ terimleri yansıma simetrisini bozarlar.

Dönme simetrisinin olup olmadığı $\vec{E}$ ve $\vec{B}$ alanlarının dönme simetrisine sahip olmalarına bağlıdır.

PROBLEMLER

9.1 *Sonsuz küçük öteleme altında $\vec{r}.\vec{L}$ operatörünün değişmediğini gösterin.*

9.2 *(a) z-ekseni etrafında θ açısı kadar dönme operatörü*

$$\mathscr{R}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

nin özdeğerlerinin mutlak değerinin 1 olduğunu gösterin.

(b) Genel olarak, birimsel operatörlerin özdeğerlerinin mutlak değer karelerinin 1 olduğunu gösterin.

9.3 *A hermitik bir operatör ise*

$$\text{(a)} \quad U = e^{i\alpha A}, \qquad \text{(b)} \quad U = \frac{A + i\mathbb{I}}{A - i\mathbb{I}}$$

operatörlerinin birimsel olduğunu gösterin (burada $\mathbb{I}$ birim matrisi temsil eder).

9.4 *A, B, C birer operatör olmak üzere, $C = AB$ ise, birimsel dönüşüm altında $C' = A'B'$ olduğunu gösterin.*

9.5 *Skaler çarpımın birimsel bir dönüşüm altında değişmediğini gösterin:*

$$\langle \phi' | \psi' \rangle = \langle \phi | \psi \rangle$$

9.6 *Bir A operatörünün izinin birimsel dönüşüm altında değişmediğini gösterin:*

$$\text{Tr } A' = \text{Tr } UAU^{\dagger} = \text{Tr } A$$

9.7 *Bir vektör operatörün bileşenleri arasında*

$$[A_x, A_y] = iA_z \qquad [A_y, A_z] = iA_x, \qquad [A_z, A_x] = iA_y,$$

sıra değiştirme bağıntısı varsa, bu bileşenlerin izlerinin sıfır olduğunu gösterin:

$$\text{Tr } A_i = 0 \qquad (i = x, y, z)$$

9.8 *Spin uzayında dönme operatörü için*

$$e^{i\theta \vec{\sigma}.\hat{n}} = \cos\theta + i \sin\theta \; \vec{\sigma}.\hat{n}$$

olduğunu gösterin (Hesabı sadece z-bileşeni için yapmak yeterlidir).

9.9 *Bir elektronun spin z-bileşeni $+\hbar/2$ olarak ölçülmüştür. Sistem y-ekseni etrafında $\pi/3$ radyan döndürülüyor. Bu kez spin z-bileşeni ölçüldüğünde $+\hbar/2$ bulma olasılığı nedir?*

9.10 *Aşağıdaki etkileşme terimlerinden hangileri öteleme, dönme ve yansıma dönüşümleri altında simetriktir ($\vec{E}$ ve $\vec{B}$ sabit birer dış alandır):*

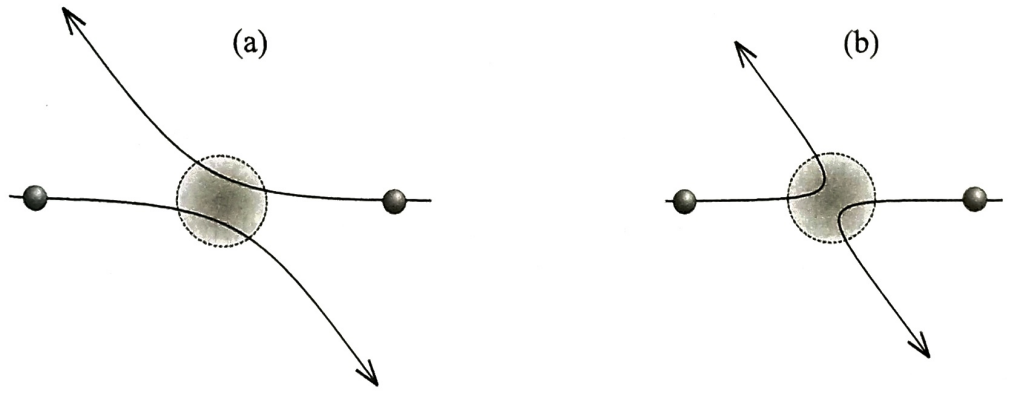
$$\vec{\sigma}.\vec{r}, \quad \vec{p}.\vec{L}, \quad \vec{r}.(\vec{\sigma} \times \vec{p}), \quad \vec{\sigma}.(\vec{p} \times \vec{L}), \quad (\vec{\sigma}.\vec{r})(\vec{p}.\vec{L}), \quad \vec{E}.\vec{p}, \quad \vec{\sigma}.\vec{B}$$

BÖLÜM 10

ÖZDEŞ PARÇACIKLAR

İki parçacığın tüm yapısal özellikleri (kütle, elektrik yükü, spin,...) aynı ise bu iki parçacık özdeştirler. Başka bir deyişle, hiçbir deneysel yöntemle ayırdedilmeleri mümkün değildir. Bu özelliğin klasik mekanikte önemli bir yeri yoktur, fakat kuantum mekaniğinde önemli sonuçlar doğurur.

Bir örnek olmak üzere, özdeş iki parçacık arasındaki çarpışmayı gözönüne alalım. Dinamik yasalarına göre bu çarpışma sonucu Şekil 10.1 deki (a) ve (b) durumlarının ikisi de mümkündür.



Şekil 10.1: İki özdeş parçacığın çarpışması.

Klasik mekaniğe göre bu iki parçacığın özdeş oluşu bir şey değiştirmez, çünkü parçacıkları aldıkları yol boyunca takip edip hangi durumun gerçekleştiğini kesin olarak bilebiliriz. Fakat, kuantum mekaniğinde durum farklıdır: Parçacıklar birbirinden uzaktayken yine ayırdedilebilirler. Ancak, etkileşme bölgesinde her iki dalga fonksiyonu birbirini örter ve hangi son durumun oluştuğunu bilemeyiz. Sorunu çözebilmek üzere, parçacıkların aldıkları yolları takip etmeye kalkarsak bu kez (belirsizlik ilkesi uyarınca) sistemi bozmuş oluruz ve farklı son durumlara yol açarız.

Bu bölümde iki veya daha çok parçacıktan oluşan sistemlerin kuantum incelenmesine bir giriş yapacağız. Konunun tam incelenmesi *çok-cisim teorisi* adı altında ileri düzeyde kitaplarda bulunabilir.

10.1 SİMETRİLEŞTİRME İLKESİ

Özdeş iki parçacıktan oluşan bir sistem için Schrödinger denklemini yazalım:

$$\left[\frac{p_1^2}{2m}+\frac{p_2^2}{2m}+V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\right]\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)}{\partial t} \tag{10.1}$$

Bu iki parçacığın tüm özellikleriyle birlikte yerlerini değiştirdiğimizde ($\vec{r}_1 \rightleftharpoons \vec{r}_2$, $\vec{p}_1 \rightleftharpoons \vec{p}_2$)

$$\left[\frac{p_2^2}{2m}+\frac{p_1^2}{2m}+V(\vec{r}_2,\vec{r}_1)\right]\Psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)}{\partial t}$$

olur. Burada, $\Psi(\ ,\ )$ yazdığımızda daima birinci boşluğa birinci parçacığın koordinatını, ikinci boşluğa da ikinci parçacığın koordinatını yazdığımız anlaşılmalıdır. Eğer parçacıkların spinleri de varsa, bu yerdeğiştirme işlemine ($\vec{s}_1 \rightleftharpoons \vec{s}_1$) spin değiştirmesini de katmak gerekir.

Bu yerdeğiştirme sonucu hamiltonyende bir değişiklik olur mu? Hayır. Kinetik enerjiler toplamı yine aynı kalır ve ayrıca, eğer parçacıklar özdeş ise, etkileşme potansiyeli

$$V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=V(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$$

olmalıdır (aksi takdirde ayırdedilebilir olurlardı). O halde, bu yerdeğiştirme sonucu elde edilen dalga fonksiyonları aynı olasılık yoğunluğuna karşı gelmelidirler ki deneysel olarak bu iki durum ayırt edilmesin:

$$|\Psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)|^2=|\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)|^2 \tag{10.2}$$

Ancak bu yerdeğiştirme simetrisine sahip fonksiyonlar özdeş parçacık sistemlerinin dalga fonksiyonları olabilirler.

Deneysel gözlemler sonucu, kuantum mekaniğinde dalga fonksiyonlarının yerdeğiştirme özelliği iki türlü gerçekleşebilmektedir. Spin serbestlik derecesini de hesaba katarsak

- *Simetrik dalga fonksiyonları*:

$$\Psi_S(\vec{r}_2,\vec{s}_2;\vec{r}_1,\vec{s}_1)=+\Psi_S(\vec{r}_1,\vec{s}_1;\vec{r}_2,\vec{s}_2)$$

- *Antisimetrik dalga fonksiyonları*:

$$\Psi_A(\vec{r}_2,\vec{s}_2;\vec{r}_1,\vec{s}_1)=-\Psi_A(\vec{r}_1,\vec{s}_1;\vec{r}_2,\vec{s}_2)$$

Her iki tür dalga fonksiyonu için tanımlanan

$$P(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=|\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)|^2 \tag{10.3}$$

olasılık yoğunluğu, $\vec{r}_1$ konumlu yerde parçacıklardan birini, $\vec{r}_2$ konumlu yerde diğerini bulma olasılığını verir. Ancak, *hangi parçacığın $\vec{r}_1$ de hangisinin $\vec{r}_2$ de olduğunu belirtmez.* Özdeş parçacıklar için bu olasılık daha anlamlıdır.

Hangi durumlarda simetrik, hangi durumlarda ise antisimetrik dalga fonksiyonları kullanacağız? 1940 yılında Pauli, bu simetri özelliği ile parçacıkların spinleri arasında ilişki olduğunu gösterdi. Kuantum mekaniğinde bu bir *Simetrileştirme İlkesi* olarak verilir:

- Spinleri yarım tamsayı olan parçacıklar (elektron, proton, nötron, ...) *antisimetrik* dalga fonksiyonlarıyla temsil edilmelidirler. Bu gruba giren parçacıkların genel adı *fermiyon*lardır.
- Spinleri 0 veya tamsayı olan diğer parçacıklar (foton, π-mezon, ...) *simetrik* dalga fonksiyonlarıyla temsil edilirler. Bunlara da *bozon*lar adı verilir

Burada tekrar vurgulayalım: Simetrik ve antisimetrik olması gereken, sistemin toplam (uzay+spin) dalga fonksiyonudur.

10.1.1 BAĞIMSIZ PARÇACIKLAR

Yukardaki incelemede ele alınan iki özdeş parçacık arasında bir $V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ potansiyeli olduğunu varsaymıştık. Şimdi bu iki parçacığın birbirinden *bağımsız* olduğunu, yani birbiriyle etkileşmeden hareket ettiğini düşünelim. Ancak, yine de her iki parçacık $V(\vec{r}_1)$ ve $V(\vec{r}_2)$ gibi birer dış potansiyel etkisi altında olabilirler. Bu duruma yaklaşık bir örnek olarak, iki elektronlu helyum atomu düşünülebilir. Burada elektronlar arası etkileşmeyi ihmal edersek, herbir elektron ile çekirdek arasında Coulomb etkileşmesi vardır.

Bu durumda, simetrileşme ilkesi elbette yine geçerlidir. Ancak, genel etkileşmeli problemin çözümü zor olduğu halde, bağımsız durumda $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ dalga fonksiyonunu kurabilmek kolaydır. Bu sistemin Schrödinger denklemi

$$\left[\frac{p_1^2}{2m}+\frac{p_2^2}{2m}+V(\vec{r}_1)+V(\vec{r}_2)\right]\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)}{\partial t} \qquad (10.4)$$

$$[H(1)+H(2)]\Psi(1,2) = i\hbar\frac{\partial\Psi(1,2)}{\partial t}$$

şeklinde $H(1)$ ve $H(2)$ hamiltonyenleri cinsinden yazılabilir. Burada

$$H(i)=\frac{p_i^2}{2m}+V(\vec{r}_i) \qquad (i=1,2) \qquad (10.5)$$

herbir parçacığın *tek-cisim hamiltonyeni* olur. Tek cisim hamiltonyeninin özdeğer problemi olan

$$H(r)\,u_n(\vec{r})=\left[\frac{p^2}{2m}+V(\vec{r})\right]u_n(\vec{r})=\varepsilon_n\,u_n(\vec{r})$$

denkleminin bir kez çözülmesi yeterlidir, her bir parçacık bu $\{u_n\}$ kümesine ait u_n ve u_m gibi iki durumda bulunacaklardır.

Bir $H(1,2)$ hamiltonyeni böyle $H(1)$ ve $H(2)$ gibi iki tane tek-parçacık hamiltonyenleri toplamı olarak yazılabiliyorsa, bu takdirde sistemin dalga fonksiyonu ve enerjisi

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_1)\,\psi(\vec{r}_2)$$
$$E = \varepsilon_1+\varepsilon_2$$

şeklinde faktörize olabilir (denklemde bu çözümü kullanarak ispat etmek kolaydır). Şimdi, 1. parçacığın n, 2. parçacığın da m kuantum sayılı özdurumda olduklarını kabul edersek, sistemin dalga fonksiyonu ve enerjisi

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = u_n(\vec{r}_1)\,u_m(\vec{r}_2) \qquad (10.6)$$
$$E = \varepsilon_n + \varepsilon_m \qquad \text{olur.}$$

Şimdi bu iki parçacığın yerdeğiştirdiğini, yani 1. parçacığın m durumuna, 2. parçacığın da n durumuna geçtiğini düşünelim. Yeni dalga fonksiyonu ($\vec{r}_1 = \vec{r}_2$) alınarak yazılırsa

$$\Psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1) = u_n(\vec{r}_2)\,u_m(\vec{r}_1)$$

olur. Hemen görülür ki bu iki dalga fonksiyonu da simetrileştirme ilkesine uymazlar:

$$\Psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1) \neq \pm\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$$

O halde, yapılacak iş bu iki dalga fonksiyonunu kullanarak simetrik veya antisimetrik bir dalga fonksiyonu elde etmektir.

Önce bu iki parçacığı bozon kabul edersek simetrik dalga fonksiyonu

$$\Psi_S(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[u_n(\vec{r}_1)\,u_m(\vec{r}_2) + u_n(\vec{r}_2)\,u_m(\vec{r}_1)\right] \qquad (10.7)$$

olur (burada $\sqrt{2}$ faktörü normlama içindir). Her iki bozon da aynı özdurumda bulunuyorsa ($n = m$) normlanmış dalga fonksiyonu

$$\Psi_S(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = u_n(\vec{r}_1)\,u_n(\vec{r}_2)$$

olur.

Benzer şekilde, iki fermiyon için antisimetrik dalga fonksiyonu yazılır:

$$\Psi_A(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[u_n(\vec{r}_1)\,u_m(\vec{r}_2) - u_n(\vec{r}_2)\,u_m(\vec{r}_1)\right] \qquad (10.8)$$

Her iki fermiyon da aynı durumda bulunurlarsa ne olur? Bu dalga fonksiyonunda ($n = m$) aldığımızda

$$\Psi_A(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = 0$$

olur, yani iki fermiyonun aynı durumda bulunduğu dalga fonksiyonu özdeş olarak sıfırdır. *Pauli ilkesi* olarak bilinen bu özellik fermiyonlar (elektron, nötron, proton) için çok önemli sonuçlara yol açar.

Alıştırma 10.1 : Sonsuz potansiyel kuyusunda iki özdeş parçacıktan biri taban durumunda, diğeri ise 1. uyarılmış durumda bulunmaktadır. (a) Bu sistemin simetrik ve antisimetrik dalga fonksiyonlarını yazın. (b) Toplam enerjiyi hesaplayın. (c) Parçacıklar arası uzaklığın karesi olan $(x_1 - x_2)^2$ nin beklenen değerini simetrik ve antisimetrik durumlar için hesaplayıp karşılaştırın.

Çözüm : (a) $[0,L]$ aralığındaki sonsuz kuyu çözümleri

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi x}{L} \qquad \varepsilon_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2mL^2}$$

olduğundan, taban durumu için $n = 1$ ve 1. uyarılmış durum için $n = 2$ olur. Bu dalga fonksiyonlarını önce 1. parçacık (x_1) için, sonra da x_2 için yazıp simetrileştirirsek (normlanmak için $\sqrt{2}$ ile bölündükten sonra)

$$\Psi_S(x_1,x_2) = \frac{\sqrt{2}}{L}\left[\sin\frac{\pi x_1}{L}\sin\frac{2\pi x_2}{L} + \sin\frac{\pi x_2}{L}\sin\frac{2\pi x_1}{L}\right]$$

$$\Psi_A(x_1,x_2) = \frac{\sqrt{2}}{L}\left[\sin\frac{\pi x_1}{L}\sin\frac{2\pi x_2}{L} - \sin\frac{\pi x_2}{L}\sin\frac{2\pi x_1}{L}\right] \quad \text{olur.}$$

(b) Her iki durum için de toplam enerji

$$E = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \quad \text{olur.}$$

(c) parçacıklar arası uzaklığa $d = x_1 - x_2$ dersek

$$\langle d^2\rangle = \langle\Psi|(x_1 - x_2)^2|\Psi\rangle$$

beklenen değeri her iki durum için yazılırsa

$$\langle d^2\rangle = \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \Psi^*_{S,A}(x_1,x_2)\,(x_1-x_2)^2\,\Psi_{S,A}(x_1,x_2)$$

olur. Yukarda verilen Ψ_S ve Ψ_A dalga fonksiyonları yerine konup integraller hesaplanır (bu integraller kolay fakat uzundur). Sonuç olarak her iki simetri için

$$\langle d^2\rangle_S = \left[\frac{4\pi^2-15}{24\pi^2} - \frac{512}{81\pi^4}\right] L^2 = 0.04L^2$$

$$\langle d^2\rangle_A = \left[\frac{4\pi^2-15}{24\pi^2} + \frac{512}{81\pi^4}\right] L^2 = 0.17L^2$$

Bu sonuca göre, simetrik durumda (bozonlar) parçacıklar ortalama olarak birbirlerine daha yakın bulunurlar. Antisimetrik durumda (fermiyonlar) parçacıklar arasında daha büyük bir uzaklık oluşur. Fermiyonların bu özelliği çok geneldir: Fermiyonlar, Pauli ilkesinin bir sonucu olarak, birbirlerinden uzakta durmaya meyil ederler.

10.1.2 İKİ ELEKTRON SİSTEMİ

Buraya kadarki kısımlarda parçacıkların spini olmadığını varsaydık ve simetrileştirme ilkesini sadece uzay koordinatlarına uygulayıp ($\vec{r}_1 \rightleftharpoons \vec{r}_2$) değişmesi altında simetrik veya

antisimetrik dalga fonksiyonları elde ettik. Ancak, en genel anlamda simetrileştirme ilkesi hem uzay ve hem de spin koordinatlarının değiştirilmesini gerektirir.

Bir elektron için uzay ve spin dalga fonksiyonlarının çarpımı alındığını biliyoruz. İki elektron için de böyle bir çarpımı

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2;\vec{s}_1,\vec{s}_2) = \psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\,\chi(\vec{s}_1,\vec{s}_2) \tag{10.9}$$

şeklinde yazabiliriz. Buradaki toplam spin dalga fonksiyonu χ Kısım 8.3.1 de ($S=1$ ve $S=0$) için elde edilmişti:

$$\begin{aligned}
\text{Toplam } S=1 \text{ için} \quad \chi = |1M\rangle \qquad & (M=-1,0,1)\\
|1\,1\rangle &= \alpha(1)\,\alpha(2)\\
|1\,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,[\alpha(1)\,\beta(2)+\beta(1)\,\alpha(2)]\\
|1{-}1\rangle &= \beta(1)\,\beta(2)
\end{aligned}$$

$$\text{Toplam } S=0 \text{ için} \quad \chi = |0\,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,[\alpha(1)\,\beta(2)-\beta(1)\,\alpha(2)]$$

Bunlardan, $S=1$ olan üçlü grubun 1 ve 2 indisleri yerdeğiştirdiğinde simetrik, $S=0$ olan diğer fonksiyonun da antisimetrik olduğunu görmüştük.

O halde, iki fermiyon sisteminin (uzay+spin) toplam dalga fonksiyonunu antisimetrik yapabilmek için iki yol vardır:

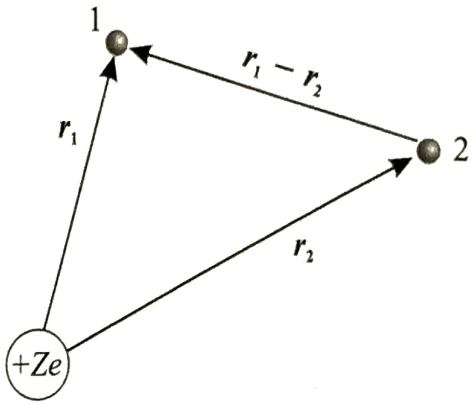
- Simetrik uzay dalga fonksiyonu ile antisimetrik spin dalga fonksiyonu çarpımını almak:

$$\begin{aligned}
\Psi_A &= \psi_S(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\,\chi_A(\vec{s}_1,\vec{s}_2)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}[u_n(\vec{r}_1)u_m(\vec{r}_2)+u_n(\vec{r}_2)u_m(\vec{r}_1)]\;|0\,0\rangle
\end{aligned}$$

- Antisimetrik uzay dalga fonksiyonu ile simetrik spin dalga fonksiyonu çarpımını almak:

$$\begin{aligned}
\Psi_A &= \psi_A(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\,\chi_S(\vec{s}_1,\vec{s}_2)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}[u_n(\vec{r}_1)u_m(\vec{r}_2)-u_n(\vec{r}_2)u_m(\vec{r}_1)]\;|1M\rangle
\end{aligned}$$

İki elektron aynı uzay dalga fonksiyonuna sahipse ($n=m$), yukardaki dalga fonksiyonlarından, uzay kısmı antisimetrik olanı sıfır olur. O halde, aynı yörüngedeki iki elektronun spinleri toplamı 1 olamaz. Başka bir deyişle, spinleri antiparalel olmak zorundadır. Helyum atomunun taban durumundaki iki elektron için toplam spin bu nedenle sıfır olur ve taban durumunda katlılık olmaz.



Şekil 10.2: Helyum atomunda koordinatlar.

10.2 HELYUM ATOMU PROBLEMİ

Buraya kadar olan incelemenin ışığında, şimdi iki elektronlu en basit fiziksel sistem olarak helyum atomunu inceleyebiliriz. Helyum atomu $Z = 2$ yüklü bir çekirdek ile iki elektrondan oluşur (Şekil 10.2). Helyum çekirdeğinin kütlesi elektronlara kıyasla çok daha büyük olduğundan, elektronların sabit bir çekirdek potansiyelinde ve birbirleriyle etkileşerek hareket ettiklerini düşünebiliriz. Bu sistemin hamiltonyeni

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \tag{10.10}$$

olur (çekirdek yükünü daha sonra $Z = 2$ olarak alacağız). Bu hamiltonyenin elektronlar yerdeğiştirdiğinde simetrik kaldığı hemen görülebilir. İncelememizde, önce hamiltonyendeki son terimi ihmal ederek elektronları bağımsız parçacıklar olarak alacağız. Daha sonra elektron-elektron etkileşmesini pertürbasyon yöntemiyle hesaba katacağız.

Bu hamiltonyeni tek elektron hamiltonyenleri cinsinden

$$H = H(1) + H(2) + V$$

olarak yazdığımızda

$$H(i) = \frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \qquad (i = 1,2)$$

$$V = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$H(i)$ hamiltonyenlerinin özdeğer ve özfonksiyonlarını hidrojen atomu incelenirken bulmuştuk. O halde, önce $V = 0$ aldığımızda toplam dalga fonksiyonu ve enerji özdeğeri

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = u_{n_1 l_1 m_1}(\vec{r}_1)\, u_{n_2 l_2 m_2}(\vec{r}_2) \tag{10.11}$$

$$E = \varepsilon_{n_1} + \varepsilon_{n_2} \qquad \varepsilon_n = -\frac{13.6Z^2}{n^2}\ \text{eV}$$

En ilkel yaklaşımda helyum atomunun taban durumu ($n_1 = n_2 = 1$) ve 1. uyarılmış durumu ($n_1 = 1, n_2 = 2$) enerjileri ($Z = 2$ alınırsa)

$$E_0 = -(4+4) \times 13.6 = -109\ \text{eV} \qquad E_1 = -(4+1) \times 13.6 = -68\ \text{eV}$$

olur. Deneysel olarak ölçülen taban durumu enerjisi –79 eV dir.

Şimdi, elektron-elektron etkileşme terimini pertürbasyon olarak alalım ve toplam enerjiye katkısını hesaplayalım. Önce taban durumunu ele alalım: Yukarda belirttiğimiz üzere, taban durumundaki iki elektronun uzay dalga fonksiyonları aynı olduğundan spin dalga fonksiyonu $S = 0$ değerine karşılık gelen antisimetrik $|0\ 0\rangle$ vektörüdür. O halde, taban durumu için pertürbasyon yöntemi uygulanırsa

$$\begin{aligned} E &= \varepsilon_1 + \varepsilon_1 + \Delta E \\ \Delta E &= \int d^3r_1 \int d^3r_2\, \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\, \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\ \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= u_{100}(\vec{r}_1)\, u_{100}(\vec{r}_2)\, |0\ 0\rangle \end{aligned}$$

Bu etkileşme spine bağlı olmadığından skaler çarpımlar sonucu geriye sadece uzay dalga fonksiyonları kalır:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \int d^3r_1 \int d^3r_2\, u^*_{100}(\vec{r}_1)\, u^*_{100}(\vec{r}_2)\, \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, u_{100}(\vec{r}_1)\, u_{100}(\vec{r}_2) \\ &= \int d^3r_1 \int d^3r_2\, |u_{100}(\vec{r}_1)|^2\, \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, |u_{100}(\vec{r}_2)|^2 \end{aligned}$$

Bu integrali hesaplamak biraz uzun sürer ama kolaydır. Taban durumundaki bir elektron için dalga fonksiyonu yazılırsa

$$u_{100}(\vec{r}) = R_{10}(r)\, Y^0_0(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{Z}{a}\right]^{3/2} e^{-Zr/a}$$

$$\Delta E = \left[\frac{Z^3 e}{\pi a^3}\right]^2 \int d^3r_1 e^{-2Zr_1/a} \int d^3r_2\, \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, e^{-2Zr_2/a}$$

olur. Bu ifadede, $\vec{r}_1$ veya $\vec{r}_2$ koordinatını belirtmek üzere seçilen koordinat sisteminin uzayda özel bir yönde olması gerekmez. Önemli olan $\vec{r}_1$ ve $\vec{r}_2$ nin birbirine göre aldığı konumdur (başka bir deyişle, z-eksenini hangi yönde seçersek seçelim, integral içindeki r_1, r_2 veya $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ değerlerinde hiçbir değişiklik olmaz). O halde, $\vec{r}_1$ koordinatını z-ekseni yönünde seçersek işlemler kolaylaşır. Bu durumda $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ faktörünün kutupsal koordinatlardaki ifadesi

$$|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta}$$

yani vektörler arasındaki açı z-ekseniyle olan θ açısı olur. Hacım elemanları da

$$d^3r_1 = 4\pi r_1^2\, dr \qquad d^3r_2 = 2\pi\, r_2^2 dr_2 \sin\theta\, d\theta$$

olacağından, integralin aldığı şekil

$$\begin{aligned} \Delta E &= 8e^2 \left[\frac{Z}{a}\right]^6 \int_0^\infty dr_1\, r_1^2\, e^{-2Zr_1/a} \int_0^\infty dr_2\, r_2^2\, e^{-2Zr_2/a} \\ &\quad \times \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\, \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta}} \end{aligned}$$

olur. Paydadaki ifade, r_1 ve r_2 nin büyüklüğüne göre iki şekilde de Legendre polinomlarının üretici fonksiyonudur ve şöyle bir seri olarak yazılabilir:

$$\frac{1}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\theta}} = \begin{cases} \dfrac{1}{r_1}\displaystyle\sum_l \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l P_l(\cos\theta) & (r_1 > r_2 \text{ ise}) \\ \dfrac{1}{r_2}\displaystyle\sum_l \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l P_l(\cos\theta) & (r_2 > r_1 \text{ ise}) \end{cases}$$

Her iki durumda da açısal integral

$$\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\, P_l(\cos\theta)$$

olur. Bu integral Legendre polinomlarının diklik bağıntısı

$$\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\, P_{l'}(\cos\theta)\, P_l(\cos\theta) = \frac{2}{2l+1}\,\delta_{ll'}$$

ifadesinin $l' = 0$ veya $P_0 = 1$ alınmış özel halidir. O halde, integral sonucu

$$\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\, \frac{1}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\theta}} = \begin{cases} \dfrac{2}{r_1} & (r_1 > r_2) \\ \dfrac{2}{r_2} & (r_2 > r_1) \end{cases}$$

olur. r_2 integralindeki $[0,\infty]$ aralığı $[0,r_1]$ ve $[r_1,\infty]$ gibi iki bölgeye ayrılırsa 1. bölgede $(2/r_1)$, 2. bölgede ise $(2/r_2)$ değeri kullanılabilir. Buna göre

$$\Delta E = 8e^2\left[\frac{Z}{a}\right]^6 \int_0^\infty dr_1\, r_1^2\, e^{-2Zr_1/a}\left\{\frac{2}{r_1}\int_0^{r_1} dr_2\, r_2^2\, e^{-2Zr_2/a} + 2\int_{r_1}^\infty dr_2\, r_2\, e^{-2Zr_2/a}\right\}$$

yazılabilir. Radyal integraller hesaplanırsa sonuç olarak

$$\Delta E = \frac{5}{8}\,\frac{Ze^2}{a} = \frac{5}{16}Z \times 13.6\ \text{eV} \qquad (10.12)$$

bulunur. $Z = 2$ için bunun değeri 34 eV olup pertürbasyon ifadesine eklenirse

$$E = \varepsilon_1 + \varepsilon_1 + \Delta E = -108 + 34 = -75\ \text{eV}$$

Böylece, deneysel değere çok daha yaklaşmış oluruz.

Şimdi, helyum atomunun 1. uyarılmış durumunu ele alalım. Bu hesap uzun olduğu için ana hatlarıyla göstereceğiz.

Helyum atomunun 1. uyarılmış durumunda $(n_1 = 1, l_1 = 0)$ ve $(n_2 = 2, l_2 = 1, \text{veya } 0)$ olabilir ($2s$ veya $2p$ durumları). $l = 0$ için spin dalga fonksiyonu antisimetrik olduğundan, uzay dalga fonksiyonu simetrik olmalıdır. Bu duruma tekli (singlet) durumu denir ve

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_{100}(\vec{r}_1)u_{200}(\vec{r}_2) + u_{100}(\vec{r}_2)u_{200}(\vec{r}_1)]\ |0\ 0\rangle$$

olarak yazılır. Benzer şekilde ($l = 1, m = -1, 0, 1$) spin durumları simetrik olduğundan, dalga fonksiyonunun uzay kısmı antisimetrik olmalıdır. Üçlü (triplet) denilen bu durumların toplam dalga fonksiyonu da

$$\Psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_{100}(\vec{r}_1)u_{21m}(\vec{r}_2) - u_{100}(\vec{r}_2)u_{21m}(\vec{r}_1)]\ |1\ M\rangle$$

olarak yazılır.

Elektron-elektron etkileşme terimi spine bağlı olmadığı için 1. uyarılmış durum dalga fonksiyonlarının sadece uzay kısımlarını, simetrik ve antisimetrik durumlar için birlikte yazarsak

$$\psi_{S,T}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_{100}(\vec{r}_1)u_{2lm}(\vec{r}_2) \pm u_{100}(\vec{r}_2)u_{2lm}(\vec{r}_1)] \qquad (l = 0, 1)$$

olur. Burada tekli ψ_S için $l = 0$ ve üçlü ψ_T için de $l = 1$ alınması gerektiğini unutmayalım. Buna göre, etkileşme teriminin enerjiye katkısı

$$\begin{aligned}\Delta E_{S,T} &= \frac{e^2}{2}\int d^3r_1 \int d^3r_2 [u_{100}(\vec{r}_1)u_{2lm}(\vec{r}_2) \pm u_{100}(\vec{r}_2)u_{2lm}(\vec{r}_1)]^* \\ &\quad \times \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\,[u_{100}(\vec{r}_1)u_{2lm}(\vec{r}_2) \pm u_{100}(\vec{r}_2)u_{2lm}(\vec{r}_1)]\end{aligned}$$

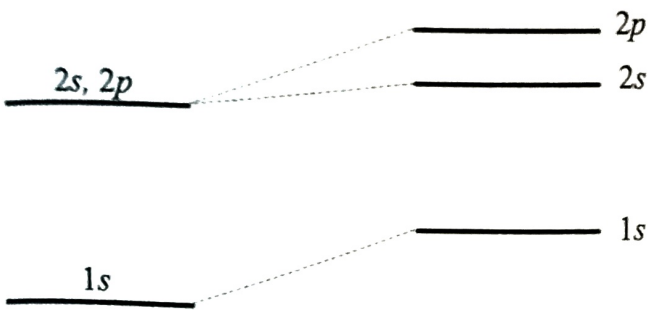
Bu etkileşme spin z-bileşenine bağlı olmadığı için $m = 0$ durumu için hesap yapmak yeterlidir. Parantezler açılıp, gerektiği yerde $\vec{r}_1 \rightleftharpoons \vec{r}_2$ değişkenleri değiştirilirse sonuçta sadece iki integral kalır:

$$\begin{aligned}\Delta E_{S,T} &= e^2 \int d^3r_1 \int d^3r_2 |u_{100}(\vec{r}_1)|^2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} |u_{210}(\vec{r}_2)|^2 \\ &\quad \pm \int d^3r_1 \int d^3r_2 e^2 u_{100}(\vec{r}_1)^* u_{210}(\vec{r}_2)^* \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, u_{100}(\vec{r}_2)u_{210}(\vec{r}_1) \\ &= A \pm B \qquad (l = 0 \text{ için } +,\quad l = 1 \text{ için } -\ \text{işaret})\end{aligned}$$

Buradaki A ve B integralleri üzerinde biraz duralım: $\rho(\vec{r}) = e|u_{nlm}(\vec{r})|^2$ büyüklüğüne yük yoğunluk dağılımı gözüyle bakarsak, A integralinin klasik yorumu, iki yük dağılımı arasındaki *Coulomb etkileşme enerjisi* olur. B integrali ise tamamen simetrileşme sonucu ortaya çıkan ve klasik fizikte karşılığı olmayan bir terimdir. Buna ***değiş-tokuş (exchange) enerjisi*** denir. A ve B integrallerinin sonucu ($A > B$) olan iki pozitif sayı çıkar. Buna göre, uyarılmış durumun toplam enerjisi

$$\begin{aligned}E_S &= \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \Delta E_S = -68 + (A - B) \\ E_T &= \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \Delta E_T = -68 + (A + B)\end{aligned}$$

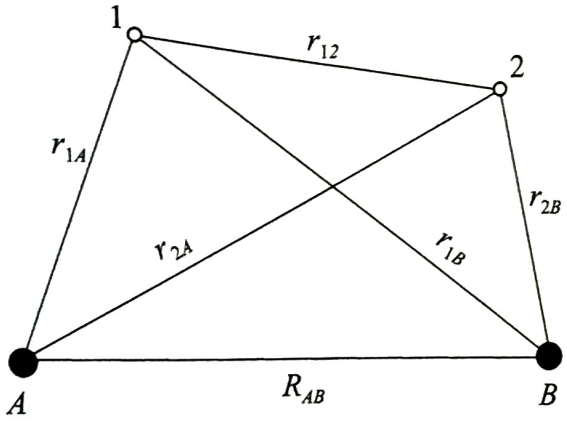
olur. O halde, $2p$ triplet durumu $2s$ durumundan biraz daha yukarı çekilmiş olur. Şekil 10.3 de helyum atomunun taban ve 1. uyarılmış durum enerjileri şematik olarak verilmiştir.



Şekil 10.3: Helyum atomunda taban ve 1. uyarılmış enerji düzeyleri.

10.3 HİDROJEN MOLEKÜLÜ PROBLEMİ

Özdeş parçacıklar formalizminin ikinci önemli uygulaması hidrojen molekülüdür. Burada herbir hidrojen çekirdeğine (proton) bağlı birer elektron olup, tüm bu yüklü parçacıklar arasında Coulomb etkileşmesi sözkonusudur. Bu karmaşık problemi çözebilmek için bir dizi yaklaşık yöntem kullanmak zorunludur. Burada *Heitler-London yöntemi* denilen yaklaşık çözümün ana hatlarını görelim.



Şekil 10.4: Hidrojen molekülünde koordinatlar.

Problemi ortaya koyabilmek için herbir parçacığın koordinatını belirleyelim. Protonları A ve B indisleriyle, elektronları ise 1 ve 2 indisleriyle gösterelim. Şekil 10.4 de bu koordinatlar görülmektedir. Bu sistemin en genel hamiltonyeni

$$H = \frac{p_A^2}{2M} + \frac{p_B^2}{2M} + \frac{e^2}{R_{AB}} + \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{e^2}{r_{2B}} - \frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2A}} + \frac{e^2}{r_{12}} \qquad (10.13)$$

olur. M, m sırasıyla proton ve elektron kütlelerini gösterir. Elektronların hareketini incelerken, kütleleri daha ağır olan protonların hareketini ihmal edebiliriz ($p_A^2 = p_B^2 = 0$). Geriye kalan hamiltonyeni şöyle gruplayalım:

$$\begin{aligned} H &= H_{1A} + H_{2B} + V \\ H_{1A} &= \frac{p_1^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{1A}} \qquad H_{2B} = \frac{p_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{2B}} \\ V &= -\frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2A}} + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R_{AB}} \end{aligned}$$

Bu bakış açısında, 1. elektronun A çekirdeğine, 2. elektronun da B çekirdeğine bağlı olduğu ve geriye kalan etkileşmelerin bir pertürbasyon oluşturduğu görülür. H_{1A} ve H_{2B} hamiltonyenleri birer hidrojen atomu problemi oluşturdukları için bu çözümleri doğrudan yazabiliriz. Her iki elektron da taban durumunda ise

$$H_0 = H_{1A} + H_{1B}$$

hamiltonyeninin çözümleri, simetrik veya antisimetrik olarak yazılabilirler (Şekilde görüldüğü üzere, iki elektron yerdeğiştirdiğinde $r_1 \rightleftharpoons r_{2A}$ ve $r_2 \rightleftharpoons r_{1B}$ olduğuna dikkat edelim):

$$\begin{aligned}
\psi_S &= \frac{1}{\sqrt{2}}[u_0(\vec{r}_{1A})u_0(\vec{r}_{2B}) + u_0(\vec{r}_{2A})u_0(\vec{r}_{1B})] \qquad (S=0 \text{ spin singlet durumu için}) \\
\psi_A &= \frac{1}{\sqrt{2}}[u_0(\vec{r}_{1A})u_0(\vec{r}_{2B}) - u_0(\vec{r}_{2A})u_0(\vec{r}_{1B})] \qquad (S=1 \text{ spin triplet durumu için}) \\
E &= 2\varepsilon_1 = 2\times(-13.6) = -27.2 \text{ eV}
\end{aligned}$$

Burada $u_0(\vec{r}) = u_{100}(\vec{r})$ taban durumu dalga fonksiyonudur. Şimdi etkileşme terimlerini pertürbasyon yöntemiyle ele alırsak enerjiye katkıları

$$\Delta E_{S,A} = \langle \psi_{S,A}|V|\psi_{S,A}\rangle = \langle \psi_{S,A}| \left[-\frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2A}} + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R_{AB}}\right] |\psi_{S,A}\rangle$$

olur. Yazılımları kısaltmak amacıyla $u_0(\vec{r}_{1A}) = u_{1A}$, $u_0(\vec{r}_{1B}) = u_{1B}$ kullanırsak

$$\Delta E_{S,A} = \frac{1}{2}\langle u_{1A}u_{2B} \pm u_{2A}u_{1B}| \left[-\frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2A}} + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R_{AB}}\right] |u_{1A}u_{2B} \pm u_{2A}u_{1B}\rangle$$

Bu ifadede herbir terim ayrı ayrı yazıldığında, elektron ve çekirdek indisleri açısından birçok terimin aynı sonucu verdiği görülebilir. Örneğin

$$\langle u_{1A}u_{2B}| \frac{e^2}{r_{12}} |u_{1A}u_{2B}\rangle \quad \text{ile} \quad \langle u_{1B}u_{2A}| \frac{e^2}{r_{12}} |u_{1B}u_{2A}\rangle$$

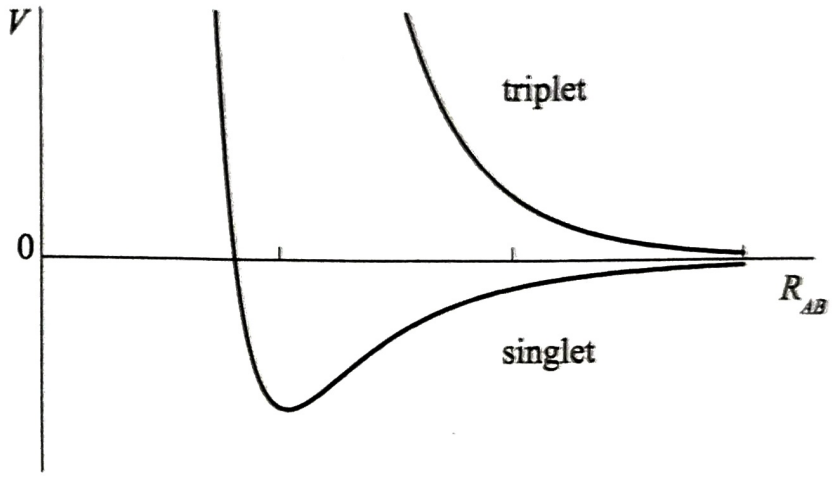
integrallerinde değişkenlerin adları ne olursa olsun aynı Coulomb etkileşme terimini verirler. Benzer şekilde

$$\langle u_{1A}u_{2B}| \frac{e^2}{r_{12}} |u_{1B}u_{2A}\rangle \quad \text{ile} \quad \langle u_{1B}u_{2A}| \frac{e^2}{r_{12}} |u_{1A}u_{2B}\rangle$$

terimleri aynı değiş-tokuş enerjisini temsil ederler.

Bu integrallerin ifadeleri sayfalarca uzun olduğu için burada vermiyoruz.Ancak, tüm bu terimlerin integralleri alındıktan sonra r_1 ve r_2 elektron koordinatlarına bağlılıklar ortadan kalkar. Geriye sadece çekirdekler arası R_{AB} uzaklığı kalır. Sonuçlar bu R_{AB} parametresinin bir fonksiyonu olarak yazılır:

$$\Delta E_{S,A} = \langle V\rangle = \bar{V}(R_{AB})$$



Şekil 10.5: Singlet ve triplet durumları için etkileşme teriminin çekirdekler arasındaki R_{AB} uzaklığıyla değişimi.

Şekil 10.5 de simetrik (singlet) ve antisimetrik (triplet) durumları için etkileşme potansiyelinin R_{AB} uzaklığına bağlılığı verilmiştir.

İki atomun birbirine bağlanıp bir molekül oluşturabilmesi için bu etkileşme potansiyeli bir minimum verebilmelidir. Şekilde görüldüğü gibi, etkileşme potansiyeli sadece singlet durumu için minimum vermektedir. O halde, hidrojen molekülü ancak bu $S = 0$ (spin antiparalel, uzay simetrik) durumunda bağlı kalabilir. Bu bağ *kovalent bağ* olarak bilinir.

10.4 N-PARÇACIK SİSTEMLERİ

Buraya kadar özdeş iki parçacık sistemlerini inceledikten sonra, artık simetrileştirme ilkesini N tane özdeş parçacıktan oluşan sistemlere genelleştirebiliriz.

Fermiyonlar. Önce, fermiyonları ele alalım. Bağımsız N elektrondan oluşan bir sistemde, herbir elektron için $\{u_i(\vec{r})\}$ uzay özfonksiyonlar kümesi biliniyor olsun. Bu durumda, herbir elektron bu kümeye ait özfonksiyonlardan birinde bulunacaktır. Spin dalga fonksiyonu da $\chi(s_z)$ ile gösterilirse, bir elektronun komple dalga fonksiyonu

$$\phi(\vec{r}, s_z) = u_n(\vec{r})\chi(s_z)$$

olur. Burada χ spin durumu α veya β özdurumlarından ($s_z = \pm\hbar/2$) biridir. Böylece, herbir elektron bu (uzay+spin) özdurumlarından birini işgal edecektir. Örneğin, 1. elektron $\phi_a(\vec{r}_1, s_{1z})$ durumunda, 2. elektron $\phi_b(\vec{r}_2, s_{2z})$ durumunda,..., ve N. elektron $\phi_g(\vec{r}_N, s_{Nz})$ durumunda bulunuyor olsun. Tüm sistem için bu durumların çarpımı alındığında

$$\Psi(1,2,\ldots,N) = \phi_a(1)\phi_b(2)\ldots\phi_g(N)$$

olur (burada 1 indisi $\{\vec{r}_1, s_{z1}\}$ uzay ve spin koordinatlarını birlikte temsil etmektedir). Kolayca görülür ki bu dalga fonksiyonu elektronların yerdeğiştirmesi altında antisimetrik değildir, yani işaret değiştirmez. Kuracağımız antisimetrik bir dalga fonksiyonu öyle olmalıdır ki i ve j gibi herhangi iki elektron ($i \rightleftharpoons j$) şeklinde hem uzay ve hem de spin koordinatıyla birlikte yerdeğiştirdiğinde bu dalga fonksiyonu işaret değiştirsin. Bu nasıl mümkün olur?

Sorunun cevabı iki elektron için kurduğumuz antisimetrik dalga fonksiyonundadır. Spin kısmı simetrik olan dalga fonksiyonunun uzay kısmını tekrar yazalım:

$$\Psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_n(1)u_m(2) - u_n(2)u_m(1)]$$

Bu dalga fonksiyonu bize 2×2 lik bir determinantı hatırlatmaktadır. Gerçekten de, bunu şöyle yazabiliriz:

$$\Psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \det \begin{vmatrix} u_n(1) & u_n(2) \\ u_m(1) & u_m(2) \end{vmatrix}$$

Bunu genelleştirirsek, N-fermiyon sisteminin tüm parçacıklara göre antisimetrik dalga fonksiyonu

$$\Psi_A(1,2,\ldots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{vmatrix} \phi_a(1) & \phi_a(2) & \cdots & \phi_a(N) \\ \phi_b(1) & \phi_b(2) & \cdots & \phi_b(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_g(1) & \phi_g(2) & \cdots & \phi_g(N) \end{vmatrix}$$

Bu yapı incelendiğinde görülür ki her sütun indisi elektronlardan birini, her satır indisi de tek-parçacık durumlarından birini göstermektedir. Aradığımız antisimetri özelliği bu dalga fonksiyonunda vardır. Gerçekten de, herhangi iki elektron ($i \rightleftharpoons j$) şeklinde yerdeğiştirdiğinde, determinantın iki sütunu yerdeğiştirmiş olur. İki sütunu yer değiştiren determinant işaret değiştirdiği için, bu dalga fonksiyonu antisimetrik demektir.

Slater determinantı denilen bu dalga fonksiyonunun diğer bir özelliği de şudur: İki elektron aynı bir ϕ_a durumunda bulunuyorsa determinantın iki satırı birbirinin aynı olacaktır. İki satır elemanları aynı olan determinant sıfır olacağından, iki fermiyonun aynı durumda bulunmama koşulu da kendiliğinden sağlanmış olur.

Slater determinantının önündeki $1/\sqrt{N!}$ faktörü normlamayı sağlamak içindir. N-parçacık için normlama integrali hem uzay koordinatları üzerinden integral ve hem de spin z-bileşenleri üzerinden toplama alınarak yazılırsa

$$\sum_{s_{z1}} \int d^3r_1 \sum_{s_{z2}} \int d^3r_2 \ldots \sum_{s_{zN}} \int d^3r_N \, |\Psi_A(\vec{r}_1, s_{z1}; \vec{r}_2, s_{z2}; \ldots, \vec{r}_N, s_{zN})|^2 = 1$$

olur.

Bozonlar. Şimdi bozonlar için N-parçacık dalga fonksiyonuna bakalım. i ve j indisli herhangi iki bozon yerdeğiştirdiğinde toplam dalga fonksiyonu simetrik olmalı, yani işaret değişmemelidir. Tek bir bozon için dalga fonksiyonları kümesi $\{\phi_n(\vec{r})\}$ ise, iki bozon sistemi için simetrik dalga fonksiyonu hemen yazılabilir:

$$\Psi_S(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_n(1)\phi_m(2) + \phi_n(2)\phi_m(1)] \qquad (10.14)$$

Bu dalga fonksiyonu için $\Psi_S(2,1) = \Psi_S(1,2)$ olduğu kolayca görülebilir. Ayrıca, iki bozon aynı bir n durumunda bulunuyorsa $\Psi_S(1,2) \neq 0$ olur, yani iki bozon aynı durumda bulunabilir.

Bunu genelleştirirsek, N tane bozon sırasıyla $\phi_a, \phi_b, \ldots, \phi_g$ durumlarında olsun. Buna göre, çarpım dalga fonksiyonu

$$\Psi(1,2,\ldots,N) = \phi_a(1)\phi_b(2)\ldots\phi_g(N)$$

simetrik değildir. Bunu simetrik hale getirebilmek için $\{1,2,\ldots,N\}$ parçacık indislerinin, olabilecek her türlü permütasyonunu alıp eklemek yeterlidir. Bu işlemi bir determinant olarak gösteremiyoruz, ancak bir permütasyon operatörü $\mathscr{P}$ tanımlarsak

$$\Psi_S = \mathscr{N} \sum_{\mathscr{P}} \mathscr{P}\{\phi_a(1)\phi_b(2)\ldots\phi_g(N)\} \tag{10.15}$$

yazılabilir. Burada $\mathscr{P}$ operatörü parçacıkların her türlü permütasyonunu yapan operatördür.

Genellikle, N-bozon sistemleriyle uğraşmak zordur. Bunun nedeni, bu dalga fonksiyonu önündeki normlama katsayısı $\mathscr{N}$ dir. Bu katsayı için, her durumu kapsayan bir ifade yazamayız. Bir örnek olarak, tekrar iki bozon dalga fonksiyonunu alalım ve $n = m$, yani iki bozonun aynı durumda olduğu dalga fonksiyonunu yazalım:

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} \times 2\phi_n(1)\phi_n(2) = \sqrt{2}\phi_n(1)\phi_n(2)$$

Görüldüğü gibi, $n = m$ olduğunda normlama doğru çıkmamaktadır. Doğru normlama ifadesi şöyle yazılmalıdır:

$$\Psi_S(1,2) = \mathscr{N}\,[\phi_n(1)\phi_m(2) + \phi_n(2)\phi_m(1)] \qquad \mathscr{N} = \begin{cases} 1/\sqrt{2} & (n \neq m \quad \text{ise}) \\ 1/2 & (n = m \quad \text{ise} \end{cases}$$

N parçacık için normlama ifadesi daha karmaşıktır.

Alıştırma 10.2 : (a) Üç fermiyon için simetrileştirilmiş dalga fonksiyonunu yazın. (b) Lityum atomunun taban durumu dalga fonksiyonunu yazın ve enerjisini hesaplayın.

Çözüm : (a) (Uzay+spin) tek-parçacık durumlarını ϕ_a, ϕ_b, ϕ_c ile gösterirsek, 3 boyutlu Slater determinantı

$$\Psi_A(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \det \begin{vmatrix} \phi_a(1) & \phi_a(2) & \phi_a(3) \\ \phi_b(1) & \phi_b(2) & \phi_b(3) \\ \phi_c(1) & \phi_c(2) & \phi_c(3) \end{vmatrix}$$

olur. Bunu determinant hesaplarmış gibi açtığımızda

$$\begin{aligned} \Psi_A(1,2,3) \;=\; & \frac{1}{\sqrt{3!}} \Big\{ \phi_a(1)\phi_b(2)\phi_c(3) + \phi_a(2)\phi_b(3)\phi_c(1) + \phi_a(3)\phi_b(1)\phi_c(2) \\ & -\phi_a(3)\phi_b(2)\phi_c(1) - \phi_a(1)\phi_b(3)\phi_c(2) - \phi_a(2)\phi_b(1)\phi_c(3) \Big\} \end{aligned}$$

Dikkat edilirse (1,2,3) indislerinin çift sayıda permütasyonları olan terimler + işaretli, diğerleri - işaretli olarak yeralmaktadırlar.

(b) Lityum atomunda 3 elektron bulunmaktadır. En düşük enerjili $1s$ ve $2s$ durumlarının herbiri, spin özvektörleri α ve β dan biriyle çarpılırsa, 4 tane (uzay+spin) durumu elde edilir. Bunlardan $2s$ durumunda sadece α spin özvektörü kullanırsak

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{3!}} \det \begin{vmatrix} u_{100}(1)\alpha(1) & u_{100}(2)\alpha(2) & u_{100}(3)\alpha(3) \\ u_{100}(1)\beta(1) & u_{100}(2)\beta(2) & u_{100}(3)\beta(3) \\ u_{200}(1)\alpha(1) & u_{200}(2)\alpha(2) & u_{200}(3)\alpha(3) \end{vmatrix}$$

Bu dalga fonksiyonunda iki kez $1s$ durumu ve bir kez $2s$ durumu kullandığımıza göre, taban durumu enerjisi ($Z = 3$ için)

$$E_o = 2 \times \left(-\frac{13.6 \times 3^2}{1} \right) - \frac{13.6 \times 3^2}{2^2} = -275 \text{ eV} \quad \text{olur.}$$

Alıştırma 10.3 : Sonsuz kuyuda spini 0 olan 2 bozonun taban durumu ve 1. uyarılmış durumu için normlanmış dalga fonksiyonlarını yazın ve sistemin toplam enerjisini hesaplayın.

Çözüm : Taban durumunda her iki kuantum sayısı da $n_1 = n_2 = 1$ olabilir. O halde, simetrik taban durumu dalga fonksiyonu ve enerjisi

$$\Psi_S = u_1(1)u_1(2) = \frac{2}{L} \sin\frac{\pi x_1}{L} \sin\frac{\pi x_2}{L}$$
$$E_o = 2 \times \frac{\hbar^2}{2mL^2} = \frac{\hbar^2}{mL^2}$$

olur. 1. uyarılmış durumda ($n_1 = 1, n_2 = 2$) alınıp simetrileştirilirse

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_1(1)u_2(2) + u_1(2)u_2(1)] = \frac{\sqrt{2}}{L}\left[\sin\frac{\pi x_1}{L} \sin\frac{2\pi x_2}{L} + \sin\frac{\pi x_2}{L} \sin\frac{2\pi x_1}{L}\right]$$
$$E_o = \frac{\hbar^2}{2mL^2} + \frac{4\hbar^2}{2mL^2} = \frac{5\hbar^2}{2mL^2} \quad \text{olur}$$

10.5 DURUM YOĞUNLUĞU

N-fermiyon sistemlerinin ayrıntılı incelenmesi kuantum statistik mekanik konusuna girer. Burada, son bir uygulama olarak, Fermi-Dirac statistiğindeki hesaplarda çok kullanılan *durum yoğunluğu* kavramını inceleyeceğiz.

Konuyu en basit şekilde ortaya koyabilmek için, 3 boyutlu uzayda kübik sonsuz kuyu potansiyelini ele alalım. Bir kenarı L olan bir küp içinde hapsedilmiş bir parçacık için potansiyel fonksiyonu

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & (0 < x < L, \quad 0 < y < L, \quad 0 < z < L \text{ ise}) \\ +\infty & \text{diğer yerlerde} \end{cases}$$

olur. Bu sistemin Schrödinger denklemi kartezyen koordinatlarda yazılırsa

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)=E\psi(x,y,z)$$

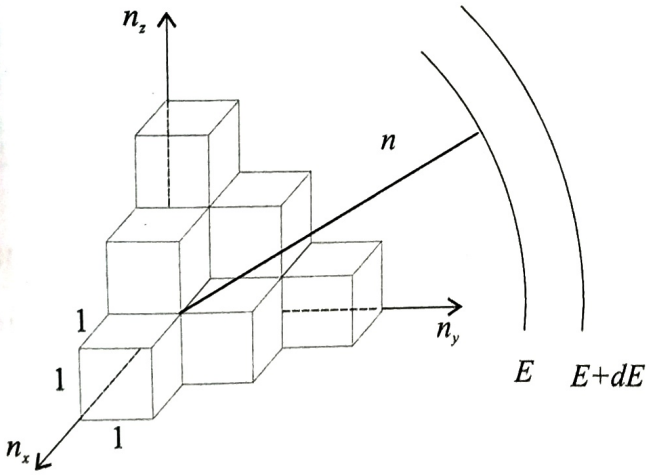
bu hamiltonyen $H(x)+H(y)+H(z)$ toplamı şeklinde yazılabildiği için çözümler de $\psi(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z)$ gibi üç faktörün çarpımı olarak yazılabilir. O halde, herbir boyut için tek boyutlu sonsuz kuyu çözümleri alınırsa sonuç olarak özfonksiyonlar ve enerji özdeğerleri şöyle yazılabilir:

$$\begin{aligned}\psi_{n_1,n_2,n_3}(x,y,z) &= N\sin\frac{n_1\pi x}{L}\ \sin\frac{n_2\pi y}{L}\ \sin\frac{n_3\pi z}{L}\\ E &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\left[n_1^2+n_2^2+n_3^2\right]\end{aligned}$$

Görüldüğü gibi, sistemin durumu $\{n_1,n_2,n_3\}$ gibi üç kuantum sayısıyla belirlenmiş olur. Eksenleri n_1,n_2,n_3 olan 3 boyutlu soyut bir uzayda bu durumları gösterirsek, bunlar kübik bir örgü üzerinde yer alırlar (Şekil 10.6). Bu örgünün birim hücre hacmi 1.1.1=1 olur. Bu uzaydaki herbir nokta için $n^2=n_1^2+n_2^2+n_3^2$ değerine karşılık gelen enerji

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,n^2$$

olur. Ayrıca, $(n_1^2+n_2^2+n_3^2)$ toplamı aynı olan durumlar katlı olurlar, yani orijinden aynı uzaklıkta yer alırlar (örneğin, $\{1,4,4\}$ ve $\{2,2,5\}$ durumları için bu toplam aynıdır).



Şekil 10.6: 3 boyutlu potansiyel kuyusundaki durumların 3 boyutlu uzayda temsili.

Şimdi, bu kuyuya N tane fermiyon koyduğumuzu düşünelim. Pauli ilkesine göre, aynı bir $\{n_1,n_2,n_3\}$ durumuna (spin yukarı ve aşağı olmak üzere) en fazla iki fermiyon konulabildiği açıktır. O halde, bu sistemin taban durumunda fermiyonlar, en küçük enerjili durumlardan başlamak üzere ikişer ikişer bütün durumları doldururlar.

Şimdi şu soruyu soralım: Bir sistemin toplam enerjisi E verilmişse, 0 ile E arasındaki enerjiye sahip durumların sayısı ne kadardır? Elbette, tam cevap için bu soyut uzaydaki kübik örgü noktalarını tek tek saymak ve $[n_1^2+n_2^2+n_3^2](\pi^2\hbar^2/2mL^2$ toplamı bu E enerjisine ulaşınca durmak yeterlidir. Ancak, burada hesaplarda kullanılabilecek basit bir sonuç elde etmek istiyoruz.

Küpün kenarı uzunluğu çok büyük ise ($L \gg 1$) enerji değerleri arasındaki ($\pi^2\hbar^2/2mL^2$) farkı da çok küçük olur, veya yaklaşık olarak, soyut uzaydaki noktalar sürekli bir dağılım oluştururlar.

Enerjileri 0 ile E arasında olan durumlar bu soyut uzayda yarıçapı n olan bir küre içinde (daha doğrusu, kuantum sayıları pozitif olduğundan, kürenin 1/8 lik diliminde) yer alırlar. Bu küre yarıçapı

$$n = \sqrt{\frac{2mL^2}{\pi^2\hbar^2}\,E}$$

bağıntısıyla enerjiye bağlı olduğuna göre, bunun hacmi durum sayısını verir (birim hücre hacmi 1 olduğundan):

$$\begin{aligned} N(E) &= \frac{1}{8}\frac{4\pi}{3}n^3 = \frac{\pi}{6}n^3 \\ &= \frac{V}{6\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{3/2} \end{aligned}$$

Burada $L^3 = V$ hacmını oluşturduk.

Enerjileri E ile $E + dE$ arasında olan durumların sayısına $dN(E)$ dersek, bu sayı dE aralığının büyüklüğüyle orantılı olacaktır:

$$dN(E) = \rho(E)\,dE \tag{10.16}$$

Buradaki $\rho(E)$ büyüklüğüne *durum yoğunluğu* denir. $\rho(E) = dN/dE$ yazarsak yukardaki ifadenin E ye göre türevi durum yoğunluğu ifadesini verir:

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2} \tag{10.17}$$

Durum yoğunluğunu k dalga sayısına göre tanımlamak daha yaygındır. $E = \hbar^2k^2/2m$ olduğundan

$$dN = \rho(E)\,dE = \rho(k)\,dk \tag{10.18}$$

$$\rho(k) = \rho(E)\frac{dE}{dk} = 4\pi V\,\frac{k^2}{(2\pi)^3} \tag{10.19}$$

olur. Buna göre, k ile $k + dk$ arasındaki durumların sayısı $dN = \rho(k)\,dk$ olur:

$$dN(k) = V\,\frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} \tag{10.20}$$

Bu ifade, N-fermiyon durumları üzerinde bir toplam yapılmak istendiğinde kullanılır. Örneğin, tek parçacık enerjilerinin herbir durum için toplamı şu şekilde integrale dönüştürülebilir:

$$\sum_{k\le k_F} \varepsilon_k \quad\Longrightarrow\quad V\int_0^{k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,f(\varepsilon)\,\varepsilon(k)$$

burada k_F Fermi momentumu, $f(\varepsilon)$ Fermi-Dirac dağılım fonksiyonu ve $d^3k = 4\pi k^2 dk$ olur. Bu konular statistik derslerinde daha ayrıntılı olarak incelenebilir.

PROBLEMLER

10.1 *Harmonik salınıcı potansiyelinde iki özdeş parçacıktan biri taban durumunda diğeri ise 1. uyarılmış durumdadır. (a) Bu sistem için simetrik ve antisimetrik dalga fonksiyonlarını kurun. (b) Toplam enerjiyi hesaplayın. (c) Parçacıklar arası uzaklığın karesi olan $(x_1 - x_2)^2$ nin beklenen değerini hesaplayın ve sonucu irdeleyin.*

10.2 *3 fermiyon için yazılan determinantlı dalga fonksiyonu için normlama katsayısının $1/\sqrt{3!}$ olduğunu doğrulayın.*

10.3 *Sonsuz kuyu potansiyelinde bir parçacık için taban durumu E_1 dir. (a) Bu kuyudaki 3 bozon için taban durumu enerjisinin $3E_1$, 3 elektron için ise $6E_1$ olduğunu gösterin. (b) 4 bozon veya 4 fermiyon için aynı sorunun cevabı ne olur?*

10.4 *İki bağımsız parçacık L genişliğinde bir sonsuz kuyu içindedirler. Parçacıkların toplam enerjisinin $5\hbar^2/2mL^2$ olduğu biliniyor. (a) Bu iki parçacık bozon ise, parçacıklardan birini $[0, L/6]$ aralığında, diğerini ise $[0, L/4]$ aralığında bulma olasılığı nedir? (b) Aynı soruyu iki fermiyon için cevaplayın.*

10.5 *Lityum atomunun 1. uyarılmış durumu için simetrileştirilmiş dalga fonksiyonunu yazın ve enerjisini hesaplayın.*

10.6 *4 elektronlu berilyum atomunun taban durumu ve 1. uyarılmış durumu dalga fonksiyonlarını yazın ve enerjisini hesaplayın.*

10.7 *Helyum atomu probleminde karşılaşılan Coulomb etkileşmesi (A) ve değiş-tokuş integrali (B) nin ikisinin de pozitif sonuç verdiğini ispatlayın.*

10.8 *3 bozondan ikisi $\phi_0(x)$ durumunda, diğeri ise $\phi_1(x)$ durumunda bulunmaktadır. Bu sistemin simetrik dalga fonksiyonunu yazın ve normlama katsayısının $A = 1/\sqrt{3}$ olduğunu gösterin.*

10.9 *2 boyutlu uzayda bir sonsuz kuyu potansiyelindeki fermiyonların 0 ile E enerjisi arasındaki durumlar sayısının*

$$N(E) = \frac{mL^2}{2\pi\hbar^2} E$$

ve durum yoğunluğunun

$$\rho(k) = \frac{L^2}{2\pi} k$$

olduğunu gösterin.

BÖLÜM 11

SAÇILMA

Günümüze kadar atomlar, moleküller veya elemanter parçacıkların yapısını öğrenmekte bir tek deneysel yöntem baş sırada gelmiştir: *Saçılma* adıyla bilinen bu yöntemde sabit tutulan bir *hedef* parçacık üzerine, belirli bir enerjiye sahip diğer bir parçacık (*mermi*) gönderilir ve saçılan parçacıkların yön ve enerjileri gözlenir. Mermi ile hedef arasındaki etkileşme potansiyeli, saçılan parçacıkların açısal dağılımını ve enerjilerini etkileyen başlıca faktördür.

Saçılma sonucu parçacıkların son durumuna göre saçılma türleri şöyle sınıflandırılabilir:

- Hedef parçacık taban durumunda kalabilir (*elastik saçılma*).
- Hedef parçacık uyarılmış bir duruma geçiş yapabilir (*inelastik saçılma*).
- Mermi parçacık absorplanır veya yeni parçacıklar üretilebilir (*reaksiyon saçılması*).

Saçılma problemlerinde kullanılan yöntemler buraya kadar kullandığımız yöntemlerden oldukça farklıdır. Şimdiye kadar hep, verilen bir potansiyel alanı içindeki parçacığın bağlı enerji durumlarını elde ettik. Saçılma probleminde ise, gelen parçacığın enerjisi baştan bellidir: Sonsuzdan gelen serbest bir parçacık küçük bir bölgede hede e etkileşip tekrar sonsuza (detektöre) gider, yani potansiyel içinde bağlı durumda değildir ($E > 0$). Bilinmek istenen şey, etkileşme potansiyelinin saçılma sonucu parçacıkların açısal dağılımını nasıl etkilediğidir.

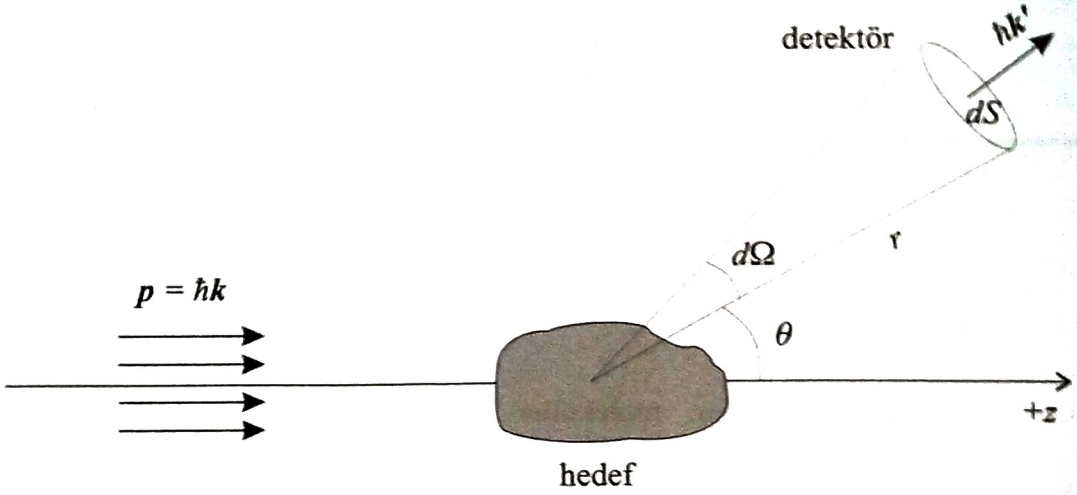
Saçılma problemlerinden çok azı tam olarak çözülebilir (örneğin, Coulomb potansiyelinde saçılma). Genellikle, saçılma konusu yaklaşık yöntemler gerektirir ve formalizmi karmaşıktır. Bu bölümde sadece elastik saçılma türü incelenip genel sonuçlar ve ilkeler çıkarılmaya gayret edilecektir.

Önce saçılma olayının deneysel düzeneğini belirleyip temel kavramları tanımlayalım.

11.1 TEMEL KAVRAMLAR

11.1.1 TESİR KESİTİ

Eşit enerjili parçacıklardan oluşan bir demetin, orijine konulmuş bir saçılma hedefi üzerine gönderildiğini varsayalım (Şekil 11.1). Gelen parçacıkların herbirinin momentumu $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ ve parçacıkların gidiş yönü z-ekseni olarak alınsın.



Şekil 11.1: Saçılma deneyinde koordinatlar.

Saçılma olayını gözlemek amacıyla kullanılan bir detektör, kutupsal koordinatları $\vec{r} = (r, \theta, \phi)$ olan bir noktaya konulmuş olsun. Genellikle her detektörün etkin bir kesit alanı vardır. Bu etkin alana dS dersek, bunun gördüğü katı açı $d\Omega$

$$d\Omega = \frac{dS}{r^2} = \sin\theta \, d\theta \, d\phi \tag{11.1}$$

bağıntısıyla verilir.

Mermi parçacıkların sürekli olarak aynı yönde ve aynı enerjide gönderildiği düşünülürse, saçılma sonucu parçacıklar da her yönde kararlı bir şekilde saçılacaklardır.

Birim zamanda ve birim kesitten geçerek gelen parçacık sayısına *akı* adı verilir ve $\mathscr{J}$ ile gösterilir. Bu akıya karşılık, detektörün kapsadığı $d\Omega$ katı açısı içine birim zamanda saçılan parçacık sayısı dN olsun.

Bir saçılma deneyinin *diferansiyel tesir kesiti*

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{birim zamanda } d\Omega \text{ açısı içine saçılan parçacık sayısı}}{\text{birim zamanda birim kesitten gelen parçacık sayısı}} = \frac{dN}{\mathscr{J}} \tag{11.2}$$

bağıntısıyla tanımlanır. Diferansiyel tesir kesitinin bir alan boyutunda (m^2) olduğuna dikkat çekelim (gerçekten de, bu büyüklük aslında kesit filan değil, saçılma olasılığıyla ilişkilidir; ancak, boyutu alan olduğu için bu terim kullanılagelmiştir).

Bu büyüklük genellikle, seçilen (θ, ϕ) kutupsal açılarının bir fonksiyonu olacaktır. Diferansiyel tesir kesitinin tüm açılar üzerinden integrali alınırsa *toplam tesir kesiti* elde edilir:

$$\sigma = \int d\Omega \, \frac{d\sigma}{d\Omega} = \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta \, d\theta \, d\phi \tag{11.3}$$

Tüm bu bağıntılar klasik ve kuantum mekaniğinde birlikte geçerlidirler. Şimdi, diferansiyel tesir kesiti için kuantum ifade elde etmeye çalışalım.

11.1.2 SAÇILMA GENLİĞİ

Saçılma probleminde iki temel varsayım vardır:

1. **Varsayım:** *Saçılma hedefinin orijinde sabit olduğu varsayılır.* Eğer hedef çok ağır bir parçacık ise, çarpışma sonucu hareketi gerçekten de ihmal edilebilir. Eğer hedef ve merminin kütleleri birbirine yakınsa, bu kez de hidrojen atomu probleminde olduğu gibi iki parçacık problemini indirgeyip, sabit bir merkezden indirgenmiş kütlenin saçılımını inceleyerek aynı sonuca ulaşmış oluruz.
2. **Varsayım:** *Etkileşme potansiyeli sonlu bir bölgede etkin olmalıdır.* Başka bir deyişle, mermi parçacık sonsuzdan yola çıktığında, hiçbir potansiyel etkisi altında olmayan serbest bir parçacık olmalıdır. Bu varsayımın amacı, asimtotik olarak düzlem dalga kullanabilme olanağı sağlar. Bu varsayımın matematiksel ifadesi $V(r)$ potansiyelinin sonsuzdaki limitinin sıfır olmasını gerektirir. Ancak, daha sonra görüleceği gibi, daha doğru bir ifade

$$\lim_{r\to\infty} r\,V(r) \longrightarrow 0 \tag{11.4}$$

olur, yani potansiyel $1/r$ den daha hızlı olarak sıfıra gitmelidir. Bu koşulun Coulomb potansiyeli $V = e^2/r$ tarafından sağlanmadığına burada dikkati çekelim:

$$\lim_{r\to\infty} r\frac{e^2}{r} = e^2 \neq 0$$

Bu özelliğinden dolayı Coulomb saçılmasının ayrı bir yeri vardır.

Şimdi, bu varsayımlara göre, saçılan parçacığın dalga fonksiyonunun alacağı şekli tahmin etmeye çalışalım:

Schrödinger denkleminin çözümü olan dalga fonksiyonu, merkezden uzakta, yani potansiyelin etkin olmadığı bölgede

$$\psi \xrightarrow{r\to\infty} \psi_{\text{inc}} + \psi_{\text{scat}} \tag{11.5}$$

şeklinde, gelen (ψ_{inc}) ve saçılan (ψ_{scat}) olmak üzere iki terimin toplamı olarak daima yazılabilir. Bu iki bileşenin alacağı şekil nasıl olabilir?

- Gelen parçacık sonsuzda serbest olduğu için düzlem dalga ile temsil edilmelidir. Enerjisi E olan serbest parçacığın dalga sayısı

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

ile belirlenir. Bu düzlem dalganın $+z$ yönünde ilerlemesini de istiyorsak

$$\psi_{\text{inc}} = e^{i\vec{k}.\vec{r}} = e^{ikz} \tag{11.6}$$

olmalıdır.

- Saçılma sonucu bu düzlem dalgaya eklenen bileşen $r = 0$ noktasından dışa doğru yayılan bir küresel dalga olmalıdır. Saçılma elastik olduğundan $k' = k$, yani dalga sayısının büyüklüğü aynı kalacaktır. Her yönde aynı genlikte yayılan (izotropik) küresel dalga ifadesinin

$$\frac{e^{ikr}}{r}$$

olduğu açıktır (burada $1/r$ faktörü dalganın yayıldıkça genliğinin azalacağını gösterir). Ancak, en genel durumda, potansiyelin etkisiyle, küresel dalganın genliği her yönde aynı olmayabilir, yani anizotropik olabilir. Bunu hesaba katmak amacıyla, küresel dalganın genliğini (θ, ϕ) açılarına bağlı bir faktörle çarparsak

$$\psi_{\text{scat}} = f(\theta, \phi)\, \frac{e^{ikr}}{r} \tag{11.7}$$

şeklinde bir ifade edilir. Buradaki $f(\theta, \phi)$ faktörüne *saçılma genliği* adı verilir.

Böylece, varsayımlara uygun en genel dalga ifadesini elde etmiş oluruz. Elbette, problemi henüz çözmüş değiliz. Sadece, saçılma dalga fonksiyonunun bulunması problemini, saçılma genliğinin bulunmasına çevirmiş olduk.

Olasılık yorumuna göre, gelen ve saçılan parçacıkların yoğunluğu şöyle tanımlıdır:

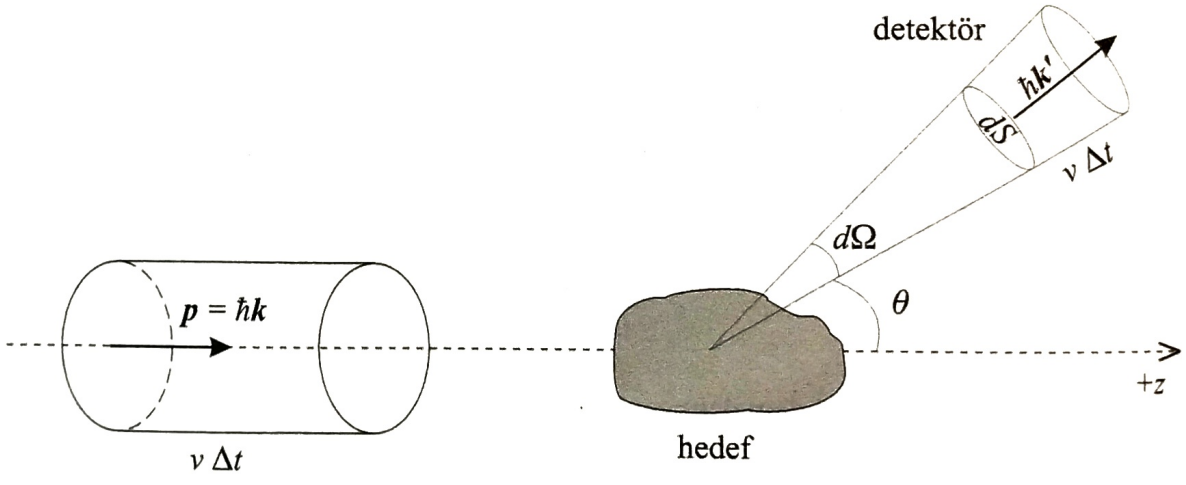
$|\psi_{\text{inc}}|^2$: Gelen parçacıkların yoğunluğu (veya, birim hacımdaki sayısı).

$|\psi_{\text{scat}}|^2$: Saçılan parçacıkların yoğunluğu (veya, birim hacımdaki sayısı).

Bir önceki bölümde diferansiyel tesir kesitini

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dN}{\mathscr{J}}$$

olarak tanımlamıştık. Burada $\mathscr{J}$ gelen parçacık akısı, dN ise birim zamanda $d\Omega$ katı açısı yönünde saçılan parçacık sayısıdır. Şimdi bu faktörleri olasılıklarla ifade edelim:



Şekil 11.2: Gelen ve saçılan parçacıkların birim zamanda kapladıkları hacimler.

$+z$ yönünde ilerleyen k dalga sayılı serbest parçacıkların kesit alanı S olan bir yüzeye girdiklerini düşünelim (Şekil 11.2). Bu durumda, gelen parçacık akısı

$$\begin{aligned}\mathscr{J} &= \frac{\Delta t \text{ zaman aralığında } S \text{ yüzeyine giren parçacık sayısı}}{\text{kesit alanı} \times \Delta t} \\ &= \frac{\text{gelen parçacık yoğunluğu} \times S \text{ alanı} \times \text{hız} \times \Delta t}{S\,\Delta t} \\ &= \frac{|\psi_{\text{inc}}|^2\, S\, v\, \Delta t}{S\,\Delta t} = |\psi_{\text{inc}}|^2\, v = |e^{ikz}|^2\, v = v\end{aligned}$$

olur (son eşitlikte gelen dalganın düzlem dalga olduğu kullanıldı).

Benzer şekilde, dN ifadesini elde edelim. Detektörün kapsadığı alan dS olsun:

$$\begin{aligned}dN &= \frac{dS \text{ kesitini } \Delta t \text{ zaman aralığında geçen parçacık sayısı}}{\text{katı açı} \times \Delta t} \\ &= \frac{\text{saçılan parçacık yoğunluğu} \times dS \text{ kesit alanı} \times \text{ hız} \times \Delta t}{d\Omega\,\Delta t} \\ &= \frac{|\psi_{\text{scat}}|^2\, r^2\, d\Omega\, v\, \Delta t}{d\Omega\,\Delta t} \\ dN &= |\psi_{\text{scat}}|^2\, r^2\, v\end{aligned}$$

olur. Buradaki hız $v = p/m = \hbar k/m$ gelen ve saçılan parçacık için aynıdır (elastik saçılma). Ψ_{scat} için yukarda seçtiğimiz ifade

$$|\psi_{\text{scat}}|^2 = \left| f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r} \right|^2 = |f(\theta,\phi)|^2\, \frac{1}{r^2}$$

olur. dN ve $\mathscr{J}$ için bulduğumuz bu ifadeler, diferansiyel tesir kesitinde kullanılırsa

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta,\phi)|^2} \tag{11.8}$$

bulunur. Deneysel olarak ölçülen büyüklük diferansiyel tesir kesiti $d\sigma/d\Omega$ dır. O halde, saçılma konusunda teoricinin yaklaşımı şöyle özetlenebilir:

- Verilen bir E enerjisi için Schrödinger denklemi çözülüp ψ dalga fonksiyonu elde edilir.
- Bu dalga fonksiyonunun asimtotik davranışı

$$\boxed{\psi \sim e^{ikz} + f(\theta,\phi)\,\frac{e^{ikr}}{r}} \tag{11.9}$$

  şeklinde ayrılır ve $f(\theta,\phi)$ saçılma genliği elde edilir.
- Saçılma genliğinden diferansiyel tesir kesitine geçmek üzere $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta,\phi)|^2$ bağıntısı kullanılır.

11.2 GREEN FONKSİYONU

Saçılma probleminin 3 boyutlu dalga fonksiyonunu elde edebilmek için zamana bağımlı pertürbasyon teorisine dayanan yaklaşık bir yöntem kullanılabilirse de, bu pek inandırıcı olmaz. Burada *Green fonksiyonları* kavramına dayalı tam çözümü vereceğiz. Matematiksel ağırlığı fazla olmasına rağmen, kitabın son konusu olması nedeniyle, daha ilginç olabilir. Bazı ayrıntıları ispatsız olarak vereceğiz.

Green fonksiyonları diferansiyel denklem çözümünde kullanılan bir tekniktir. Önce, tek boyutlu uzayda şu diferansiyel denkleme bakalım:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)\psi(x)=F(x) \tag{11.10}$$

Bu denklemde $F=0$ alırsak homojen bir denklem elde ederiz. Bunun çözümü $u(x)$ olsun:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)u(x)=0 \tag{11.11}$$

Aynı diferansiyel denklemin sağ tarafında $F(x)$ fonksiyonu yerine Dirac delta fonksiyonu alırsak, elde edilecek çözümü de G ile gösterelim:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)G(x,x')=\delta(x-x') \tag{11.12}$$

Bu delta fonksiyonlu çözüme diferansiyel denklemin *Green fonksiyonu* denir (buradaki x', diferansiyel denklem açısından sadece bir parametredir).

Eğer bir diferansiyel denklemin homojen çözümü u ve Green fonksiyonu G biliniyorsa komple çözüm

$$\psi(x)=u(x)+\int_{-\infty}^{\infty}dx'\,G(x,x')F(x') \tag{11.13}$$

olur. Bunun doğru olduğunu kontrol etmek üzere bu ifadeyi diferansiyel denklemde kullanalım:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)\left\{u(x)+\int_{-\infty}^{\infty}dx'\,G(x,x')F(x')\right\} = F(x)$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)u(x)+\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)\int_{-\infty}^{\infty}dx'\,G(x,x')F(x') = F(x)$$

Eşitliğin sol tarafındaki birinci terim homojen denklem olduğundan sıfıra eşittir. İkinci terimde ise, türevli faktörü x' integrali içine alıp sadece G ye etki ettirebiliriz:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx'\left[\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)G(x,x')\right]F(x') = F(x)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx'\,\delta(x-x')\,F(x') = F(x)$$

Eşitliğin sol tarafında Green fonksiyonunun tanım özelliği kullanıldı. Son denklemdeki ifade Dirac delta fonksiyonunun tanımına göre $F(x)$ e eşit olacaktır.

O halde, diferansiyel denklemin çözümü Green fonksiyonunun bulunmasına bağlıdır. Bu fonksiyon bulunursa denklemdeki $F(x)$ terimi değişse bile aynı Green fonksiyonu kullanılarak çözüm yazılabilir.

Yukardaki diferansiyel denklemin Green fonksiyonu ifadesi nasıldır? Bunu aramak yerine, doğrudan sonucu yazacağız:

$$G(x,x') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|x-x'|}}{|x-x'|} \tag{11.14}$$

Homojen denklem olan

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right) u(x) = 0$$

denkleminin en genel çözümü ise

$$u(x) = e^{\pm ikx}$$

olur. Gelen dalga $+x$ yönünde ilerliyorsa, $+kx$ li çözüm alınır.

Bu sonuçları toparlarsak komple çözüm

$$\psi(x) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{\pm ik|x-x'|}}{|x-x'|}F(x')\,dx' \tag{11.15}$$

olur. Şimdi aynı formalizmi 3 boyutta Schrödinger denklemine uygulayalım:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

denklemini Green fonksiyonuna uygulamak üzere

$$\left(\nabla^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(\vec{r}) = \frac{2mV(\vec{r})}{\hbar^2}\psi(\vec{r})$$

şeklinde yazarsak, k parametresi ve $F(\vec{r})$ fonksiyonu

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad F(\vec{r}) = \frac{2mV(\vec{r})}{\hbar^2}\psi(\vec{r}) \tag{11.16}$$

olur. 3 boyutlu durumda homojen çözüm yine $+z$ yönünde ilerleyen bir düzlem dalga

$$u(\vec{r}) = e^{ikz}$$

ve Green fonksiyonu

$$G(\vec{r},\vec{r}\,') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} \tag{11.17}$$

olur. Bu Green fonkisyonu $\vec{r}\,'$ noktasından yayılan küresel bir dalga biçimindedir. Ancak, hem merkeze doğru küçülen ($-ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|$) ve hem de merkezden dışarı yayılan ($+ik|\vec{r}-$

$\vec{r}\,'|$) küresel dalga çözümleri içermektedir. Saçılmada dışa doğru yayılan küresel dalga oluştuğu için + işaretli çözüm alınırsa, komple çözüm

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi}\int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}')\,\psi(\vec{r}') \tag{11.18}$$

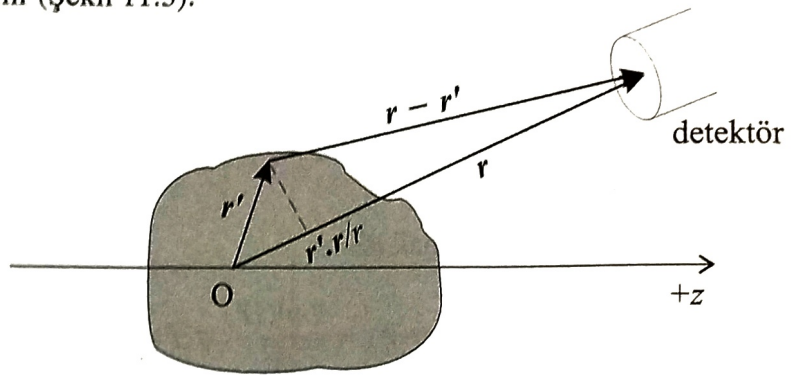
$$U(\vec{r}') = \frac{2mV(\vec{r}')}{\hbar^2}$$

olur. Bu ifadeye bakıldığında, aradığımız ψ çözümünün yine sağ taraftaki integral içinde yer aldığı görülür. Bu, *saçılmanın integral denklemi*dir.

Schrödinger diferansiyel denklemini bir integral denkleme dönüştürmekle ne kazanmış olduk? İntegral bir denklem sınır koşullarını kendi içinde taşır (e^{+ikz} ve e^{+ikr}/r faktörleri). Ayrıca, bu yapı iterasyon yoluyla çözülmeye çok uygundur: Yaklaşık bir çözümü sağ tarafta kullanıp sol taraftaki çözümü hesaplarız. Daha sonra, bu çözümü sağ tarafta kullanırız,... vs.

11.2.1 ASİMTOTİK DALGA FONKSİYONU

Etkileşme potansiyeli $V(\vec{r})$ nin orijin etrafında sınırlı bir bölgede etkin olduğunu, bunun dışında sıfır olduğunu varsaymıştık. Yukardaki integral denklemde $V(\vec{r}')$ teriminden dolayı r'-integrali orijin etrafında küçük bir bölgede katkı verecektir. Ayrıca, ölçme yaptığımız detektörün bulunduğu r uzaklığı çok daha büyük olduğundan, yaklaşık olarak $r \gg r'$ alınabilir (Şekil 11.3).



Şekil 11.3: Saçılmada $\vec{r}$ ve $\vec{r}\,'$ vektörleri.

Önce üstel fonksiyondaki $|\vec{r}-\vec{r}\,'|$ faktörünü yaklaşık olarak yazalım. Şekilden de anlaşıldığı gibi

$$|\vec{r}-\vec{r}\,'| = \sqrt{r^2+r'^2-2\vec{r}.\vec{r}\,'} \approx \sqrt{r^2\left(1-\frac{2\vec{r}.\vec{r}\,'}{r^2}\right)} \approx r - \frac{\vec{r}.\vec{r}\,'}{r}$$

Bu ifadeyi paydada kullanırken ikinci terimi de ihmal edip $|\vec{r}-\vec{r}\,'| \approx r$ alabiliriz. Ancak, üstel fonksiyonda her ikisini de almak gerekir, çünkü kompleks üstel fonksiyonda küçük bir değişim sinüs fonksiyonu olarak çok büyük etki yapabilir. Bu terimi kullandığımızda dalga fonksiyonu

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi}\int d^3r' \frac{e^{ik(r-\vec{r}.\vec{r}'/r)}}{r} U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')$$

$$= e^{ikz} - \frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int d^3r'\, e^{-ik\vec{r}.\vec{r}'/r}\, U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')$$

olur. Bu ifade, daha önce asimtotik olarak yazdığımız $\psi_{\text{inc}} + \psi_{\text{scat}}$ biçimindedir. Her ikisi karşılaştırıldığında, saçılma genliği $f(\theta,\phi)$ için

$$f(\theta,\phi) = -\frac{1}{4\pi}\int d^3r'\, e^{-ik\vec{r}.\vec{r}'/r}\, U(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,') \tag{11.19}$$

ifadesi bulunur.

Saçılma sonucu $\vec{r}$ yönünde detektöre giden parçacığın momentumuna $\vec{k}'$ dersek, elastik saçılma olduğu için $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$ olacaktır. Bu $\vec{k}'$ vektörü üstel fonksiyonda oluşturulabilir:

$$\vec{k}' = k\,\frac{\vec{r}}{r} \qquad |\vec{k}'| = |\vec{k}| = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Sonuç olarak, saçılma genliği ifadesi yazılabilir:

$$\boxed{f(\theta,\phi) = -\frac{1}{4\pi}\int d^3r\, e^{-i\vec{k}'.\vec{r}}\, U(\vec{r})\psi(\vec{r})} \tag{11.20}$$

(artık karışıklığa yol açmayacağı için bu ifadede $\vec{r}\,' = \vec{r}$ yazdık).

11.3 YAKLAŞIK BORN YÖNTEMİ

Dalga fonksiyonu için yukarda bulduğumuz

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}.\vec{r}} - \frac{e^{ikr}}{4\pi r}\int d^3r'\, e^{-i\vec{k}'.\vec{r}'}\, U(\vec{r}\,')\ \psi(\vec{r}\,')$$

ifadesi, ilke olarak, iterasyon yoluyla çözülebilir. Bunun için, integral içindeki ψ yerine bu denklemin sağ tarafını olduğu gibi koymak yeterlidir.

Saçılma genliği ifadesinde bir kez iterasyon yaparak yukardaki dalga fonksiyonunu integral içinde kullanalım:

$$\begin{aligned}
f(\theta,\phi) &= -\frac{1}{4\pi}\int d^3r\, e^{-i\vec{k}'.\vec{r}}\, U(\vec{r})\psi(\vec{r}) \\
&= -\frac{1}{4\pi}\int d^3r\, e^{-i\vec{k}'.\vec{r}}\, U(\vec{r})\left\{e^{i\vec{k}.\vec{r}} - \frac{e^{ikr}}{4\pi r}\int d^3r' e^{-i\vec{k}'.\vec{r}'} U(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')\right\} \\
&= -\frac{1}{4\pi}\int d^3r\, e^{-i(\vec{k}'-\vec{k}).\vec{r}}\, U(\vec{r}) + \frac{1}{16\pi^2}\iint d^3r\, d^3r'\, \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\vec{k}'.(\vec{r}+\vec{r}')} U(\vec{r})U(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')
\end{aligned}$$

İkinci terimde potansiyelin iki kez yer aldığına dikkati çekelim. Eğer, etkileşme potansiyeli *U zayıf* ve *kısa erimli* ise iyi bir yaklaşık çözümde ikinci terimi ihmal edebiliriz. Buna *yaklaşık Born yöntemi* denir ve saçılma genliği ifadesi

$$f(\theta,\phi) = -\frac{1}{4\pi}\int d^3r\, e^{-i(\vec{k}'-\vec{k}).\vec{r}}\, U(\vec{r}) \tag{11.21}$$

olur.

Bu ifadeyi biraz daha sadeleştirelim. Gelen parçacığın momentumu $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ ile saçılan parçacığın momentumu $\vec{p}' = \hbar\vec{k}'$ arasındaki fark

$$\hbar\vec{q} = \hbar(\vec{k} - \vec{k}')$$

momentum transferi adını alır. Fiziksel olarak, saçılma sırasında hedefteki parçacığa aktarılan momentum $\hbar\vec{q}$ kadar olur ve büyüklüğü

$$\begin{aligned} q^2 &= (\vec{k}' - \vec{k})^2 = k'^2 + k^2 - 2\vec{k}.\vec{k}' \\ &= 2k'^2 + k^2 - 2kk'\cos\theta \end{aligned}$$

dir. Burada θ *saçılma açısıdır*. $k = k'$ olduğundan

$$q = 2k\sin\frac{\theta}{2} \tag{11.22}$$

elde edilir. Eğer, potansiyel küresel simetriye sahipse ($V(\vec{r}) = V(r)$), hacım integralindeki açısal kısımlar hesaplanabilir. $\vec{r}$ değişkeninin kutupsal koordinatlarını (r, α, β) olarak yazalım (θ, ϕ sembolleri saçılma doğrultusu için kullanılmıştı). İntegral alınırken $\vec{q}$ vektörünü z doğrultusunda varsayabiliriz. Buna göre

$$d^3r = r^2\,dr\,\sin\alpha\,d\alpha\,d\beta \qquad \vec{q}.\vec{r} = qr\cos\alpha$$

yazıldığında

$$\begin{aligned} f(\theta,\phi) &= -\frac{1}{4\pi}\iiint r^2 dr\,\sin\alpha\,d\alpha\,d\beta\,e^{-iqr\cos\alpha}U(r) \\ &= -\frac{1}{4\pi}\int_0^\infty dr\,r^2\,U(r)\int_{-1}^{1} d(\cos\alpha)\,e^{-iqr\cos\alpha}\int_0^{2\pi} d\beta \\ &= -\frac{1}{4\pi}\int_0^\infty dr\,r^2\,U(r)\left[\frac{e^{-iqr} - e^{iqr}}{(-iqr)}\right]\times(2\pi) \end{aligned}$$

Sonuç olarak, küresel simetrik potansiyel için yaklaşık Born ifadesi

$$\boxed{f(\theta,\phi) = -\int_0^\infty r^2 dr\,\frac{\sin qr}{qr}\,U(r)} \tag{11.23}$$

ile verilir. Bu ifadedeki önemli noktaları vurgulayalım:

- Bu ifadedeki θ, ϕ açılarına bağımlılık $q = 2k\sin\theta/2$ momentum transferinde gizlidir. Bu bağıntıda ϕ açısı olmadığından, küresel simetrik potansiyelde saçılma genliği ϕ açısından bağımsız olur. Gerçekten de, tepe açısı θ olan bir koni üzerinde saçılan parçacıkların dağılımı her yönde aynı olur, çünkü potansiyel küresel simetriktir.
- Bu ifadede $U(r) = 2mV(r)/\hbar^2$ olduğunu ve tesir kesitine $d\sigma/d\Omega = |f(\theta,\phi)|^2$ bağıntısıyla geçildiğini hatırlayalım.

- Born yaklaşımının geçerli olabilmesi için 3 koşul vardır:
  1. Etkileşme potansiyelinin şiddeti gelen parçacığın enerjisine kıyasla zayıf olmalıdır.
  2. Potansiyelin erimi kısa olmalıdır.
  3. Saçılma açısı θ nın küçük olduğu yerlerde Born yaklaşımı daha iyi sonuç verir.

Şimdi, saçılma konusunda en temel uygulamaları inceleyelim.

11.4 UYGULAMALAR

11.4.1 KÜRESEL POTANSİYEL ENGELİNDEN SAÇILMA

Küresel potansiyel engeli

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & r \le a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

olarak tanımlanır. Saçılma genliği ifadesindeki integral 0 dan a ya kadar alınırsa

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\int_0^a dr\, r \sin qr \\ &= -\frac{2mV_0}{\hbar^2}\,\frac{\sin qa - qa\cos qa}{q^3} \end{aligned}$$

elde edilir. Diferansiyel tesir kesiti

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4}\left[\frac{\sin qa - qa\cos qa}{q^3}\right]^2 \tag{11.24}$$

olur. Şekil 11.4 de diferansiyel tesir kesitinin saçılma açısıyla değişimi gösterilmiştir. Bu şekilden görüldüğü gibi, bazı açılarda tesir kesiti birden azalmaktadır.

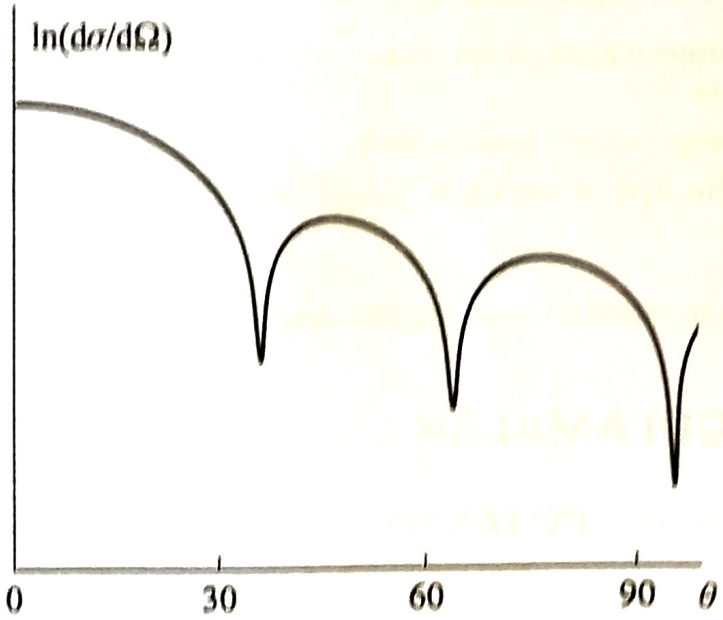
Tesir kesiti ifadesinin önemli iki limit durumu vardır:

Küçük açılar limiti ($\theta \ll 1$): θ açısı küçükse saçılma ileri yönde olacaktır. Bu durumda,

$$q = 2k\sin\frac{\theta}{2} \approx k\theta\,, \quad \sin x \approx x - \frac{1}{6}x^3\,,\ \cos x \approx 1 - \frac{1}{2}x^2 \quad \text{alınırsa}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{4m^2V_0^2a^6}{9\hbar^4} \qquad (\theta \ll 1) \tag{11.25}$$

olur, yani küçük açılarda tesir kesiti pek fazla değişmez. Şekil 11.4 de bu durum görülmektedir.



Şekil 11.4: Küresel potansiyel engelinde diferansiyel tesir kesiti.

Yüksek enerjiler limiti ($ka \gg 1$)**:** Gelen parçacığın enerjisi büyükse $ka \gg 1$ ve dolayısıyla, $qa = 2ka\sin\theta/2$ büyük olur. Bu durumda parantez içindeki ikinci terim diğerini bastırır:

$$f(\theta) \approx \frac{2mV_0a}{\hbar^2}\frac{\cos qa}{q^2}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{mV_0a}{\hbar^2k}\right)^2 \frac{\cos^2(2ka\sin\frac{\theta}{2})}{\sin^4\frac{\theta}{2}} = \frac{V_0^2a^2}{16E^2}\frac{\cos^2(2ka\sin\frac{\theta}{2})}{\sin^4\frac{\theta}{2}}$$

Tesir kesiti açıya bağlı olarak hızlı sinüzoidal değişme göstermektedir. Bu, optikten bilinen *difraksiyon saçılması*dır ve parçacığın dalga karakterinden ileri gelmektedir.

11.4.2 PERDELENMİŞ COULOMB SAÇILMASI

Yüklü bir parçacık (elektron, alfa,...,vs.) nötr bir atom üzerine gönderildiğinde, çekirdek etrafındaki elektron bulutu nedeniyle, $+Ze$ yüklü çekirdeğin etkisini hemen hissedemez. Ancak, elektron bulutu içine girdiğinde, çekirdeğin potansiyeli dereceli olarak artar. *Perdelenmiş Coulomb potansiyeli* denilen bu potansiyel şöyle ifade edilebilir:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}e^{-\alpha r} \tag{11.26}$$

Burada α parametresi perdelemenin bir ölçüsüdür. Limit durumlara bakılırsa,

$r \to 0$, $\quad e^{-\alpha r} \to 1$ (perdeleme ortadan kalkar.)

$r \to \infty$, $\quad re^{-\alpha r} \to 0$ (Coulomb potansiyelinden daha hızlı sıfıra gider.)

Bu potansiyel nükleer fizikte *Yukawa potansiyeli* olarak da bilinir. Çekirdekteki nükleonlar arasındaki kısa erimli etkileşmeyi yaklaşık olarak iyi bir şekilde temsil edebilir.

Yaklaşık Born saçılma genliğini hesaplarsak

$$f(\theta) = -\frac{2mZe^2}{\hbar^2}\int_0^\infty dr\, r^2\, \frac{e^{-\alpha r}}{r}\, \frac{\sin qr}{qr} = -\frac{2mZe^2}{\hbar^2(q^2+\alpha^2)}$$

olur. Diferansiyel tesir kesitini hesaplamak üzere $q = 2k\sin\theta/2$ alınırsa

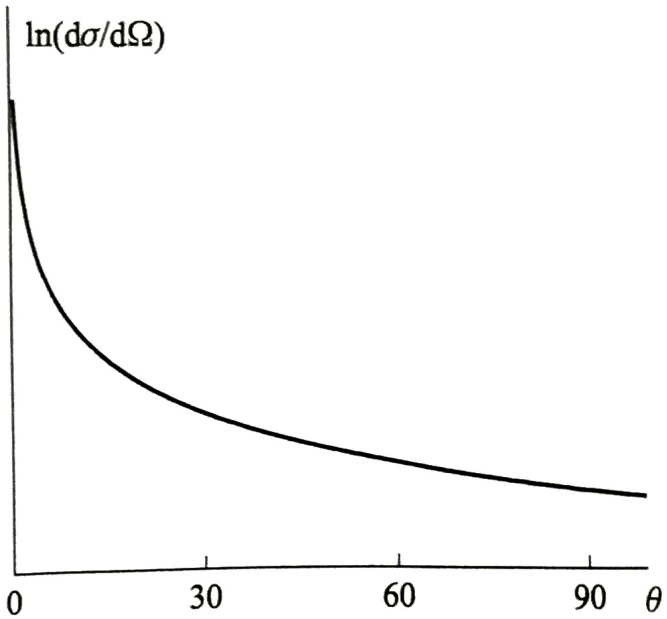
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m^2Z^2e^4}{\hbar^4}\left|\frac{1}{4k^2\sin^2\theta/2+\alpha^2}\right|^2 \tag{11.27}$$

Saf Coulomb potansiyelindeki saçılmayı bulmak istersek bu ifadede $\alpha = 0$ yapmak yeterlidir. Ayrıca, $E = \hbar^2k^2/2m$ bağıntısıyla parçacığın enerjisini oluşturursak

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2e^4}{16E^2}\,\frac{1}{\sin^4\theta/2} \tag{11.28}$$

olur. Bu ifadeye *Rutherford formülü* denilir. Coulomb saçılması klasik mekanikte de hesaplanırsa yine bu Rutherford formülü elde edilir. Kuantum ve klasik hesapların aynı sonucu vermesi ilginç bir rastlantıdır.

Şekil 11.5 de Coulomb saçılmasının diferansiyel tesir kesiti gösterilmiştir.



Şekil 11.5: Coulomb Saçılması tesir kesiti.

Coulomb saçılmasının göze çarpan özellikleri şunlardır:

- Potansiyelin işareti ne olursa olsun (itici veya çekici), tesir kesiti aynıdır.
- Açısal dağılım gelen parçacığın enerjisinden bağımsızdır.

- Belirli bir açıda, tesir kesiti enerjinin karesiyle ters orantılı olarak azalır. Bunun anlamı şudur: Enerji arttıkça parçacık Coulomb potansiyelinin etkisini daha az hissedip ileri yöndeki hareketine devam etmek ister.

Coulomb saçılmasının bazı problemleri vardır. Örneğin, $\theta = 0$ olduğunda Rutherford formülü ıraksaktır. Bunun fiziksel nedeni, Coulomb potansiyelinin kısa erimli olmayışıdır. Sonsuzda $1/r$ gibi sıfıra gider ama yine de etkisini hissettirir. Ayrıca, toplam tesir kesiti de doğru limit vermez (sonsuz olur).

PROBLEMLER

11.1 *$V(r) = Ar^{-2}$ potansiyelinden saçılan parçacıkların diferansiyel tesir kesitini yaklaşık Born yöntemiyle hesaplayın.*

(Not: $\int_0^\infty x^{-1} \sin x\, dx = \pi/2$)

11.2 *$V(r) = -V_0 e^{-\alpha r}$ üstel potansiyelinden saçılmada diferansiyel tesir kesitinin*

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4 q^2} \frac{(\alpha^2 - q^2)^2 + 4\alpha^2 q^2}{(\alpha^2 + q^2)^4}$$

olduğunu gösterin.

11.3 *$V(r) = V_0 e^{-r^2/a^2}$ Gauss potansiyelinden saçılmada diferansiyel tesir kesitinin*

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\pi m^2 V_0^2 a^6}{\hbar^4} e^{-2k^2a^2 \sin^2(\theta/2)}$$

olduğunu gösterin.

11.4 **Rezonans saçılması.** *(a) Küresel potansiyel engelinden saçılmada $qa = n\pi$ olduğunda diferansiyel tesir kesitinin sıfır olduğunu gösterin (Not: Bu durum Bölüm 4 de karşılaştığımız Ramsauer olayının 3 boyutlu şeklidir). (b) Yine aynı saçılmada, diferansiyel tesir kesitinin $qa \cot qa = 2 - V_0/E$ değerleri için maksimum olacağını gösterin.*

11.5 *Metinde incelenen küresel potansiyel engelinden saçılma için toplam tesir kesiti*

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi d(\cos\theta) \frac{d\sigma}{d\Omega} \qquad \textit{ifadesinin}$$

$$\sigma = \frac{32\pi m^2 V_0^2 a^6}{\hbar^4} \frac{1}{16(ka)^2} \left(1 - \frac{1}{(2ka)^2} + \frac{\sin 4ka}{(2ka)^3} - \frac{\sin^2 2ka}{(2ka)^4}\right)$$

olduğunu gösterin.

EKLER

EK A. REFERANSLAR

Kitabın yazılışında faydalanılan eserler şunlardır:

1. Richard L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, 4th edition, Addison-Wesley (2002).
2. P. M. Matthews and K. Venkatesan, *A Textbook of Quantum Mechanics*, Tata McGraw-Hill (1976).
3. A. M. Harun Ar Rashid, *Quantum Mechanics*, Dhaka University Press (1988).
4. Albert Messiah, *La Mécanique Quantique*, Librairie Dunod (1966).
5. Leonard I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd edition, McGraw-Hill (1968).
6. M. Alonso and H. Valk, *Quantum Mechanics: Principles and Applications*, Addison-Wesley (1973).
7. John D. McGervey, *Introduction to Modern Physics*, 2nd edition, Academic Press (1983).
8. R. Eisberg and R. Resnick, *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles*, John Wiley and Sons (1985).
9. Eugen Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 2nd edition, John Wiley and Sons (1970).
10. Alaistair I.M. Rae, *Quantum Mechanics*, 2nd edition, Adam Hilger (1986).
11. Stephen Gasiorowicz,*Quantum Physics*, John Wiley and Sons (1974).
12. David J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice-Hall (1994).

Bunlara ek olarak, öğrencilerin faydalanabileceği üç Türkçe yayın vardır:

1. Emine M. Rıza, *Kuantum Mekaniği Çözümlü Problem Kitabı*, İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi Yayını (1982).
2. Hüseyin Erbil, *Kuantum Fiziği*, 2 Cilt, Ege Üniversitesi Yayını (1991).
3. T. Dereli ve A. Verçin, *Kuantum Mekaniği*, 2 Cilt, METU Press Yayını (1998)

EK B. TEMEL FİZİK SABİTLERİ

Işık hızı	$c = 2.998 \times 10^8\,\mathrm{m\,s^{-1}}$
Elektron yükü	$e = 1.602 \times 10^{-19}\,\mathrm{C}$
Planck sabiti	$h = \begin{cases} 6.626 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s} \\ 4.136 \times 10^{-15}\,\mathrm{eV\,s} \end{cases}$
Planck sabiti (h bar)	$\hbar = \dfrac{h}{2\pi} = \begin{cases} 1.055 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s} \\ 6.582 \times 10^{-16}\,\mathrm{eV\,s} \end{cases}$
Avogadro sabiti	$N_A = 6.023 \times 10^{23}$
Boltzmann sabiti	$k_B = \begin{cases} 1.381 \times 10^{-23}\,\mathrm{J\,K^{-1}} \\ 8.617 \times 10^{-5}\,\mathrm{eV\,K^{-1}} \end{cases}$
İdeal gaz sabiti	$R = 8.314\,\mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}}$
Elektron kütlesi	$m_e = \begin{cases} 9.110 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg} \\ 0.5110\,\mathrm{MeV}\,c^{-2} \end{cases}$
Proton kütlesi	$M_p = \begin{cases} 1.6727 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg} \\ 938.28\,\mathrm{MeV}\,c^{-2} \end{cases}$
Nötron kütlesi	$M_n = \begin{cases} 1.6750 \times 10^{-27}\,\mathrm{MeV}\,c^{-2} \\ 939.57\,\mathrm{MeV}\,c^{-2} \end{cases}$
Gravitasyon sabiti	$G = 6.673 \times 10^{-11}\,\mathrm{N\,m^2\,kg^{-2}}$
İnce Yapı sabiti	$\alpha = e^2/\hbar c = 1/137.04$
Bohr yarıçapı	$a_0 = \hbar^2/m_e e^2 = \begin{cases} 5.291 \times 10^{-11}\,\mathrm{m} \\ 0.5291\,\text{Å} \end{cases}$
Rydberg sabiti	$R = m_e e^4/2\hbar^2 = \begin{cases} 1.0974 \times 10^7\,\mathrm{m^{-1}} \\ 13.61\,\mathrm{eV} \end{cases}$
Bohr magnetonu	$\mu_B = \hbar e/2m_e c = \begin{cases} 9.274 \times 10^{-24}\,\mathrm{J\,T^{-1}} \\ 0.5788 \times 10^{-10}\,\mathrm{MeV\,T^{-1}} \end{cases}$
Elektron magnetik momenti	$\mu_e = 1.0012\,\mu_B$
Nükleer magneton	$\mu_N = \hbar e/2M_p c = 5.051 \times 10^{-27}\,\mathrm{J\,T^{-1}}$
Proton magnetik momenti	$\mu_p = 2.793\,\mu_N$

EK C. PROBLEM SONUÇLARI

BÖLÜM 1

1.1 $\lambda_{max} = 5.8 \times 10^{-7}$ m.

1.2 $\lambda_{max} = 2.9 \times 10^{-10}$ m.

1.3 (a) Hayır, (b) $\lambda_{eşik} = 3185$ Å.

1.4 (a)$\lambda_{eşik} = 2929$ Å, (b) 1.97 eV, (c)8.9×10^{17} foton/s.

1.5 $E_e = 250$ eV.

1.6 $\lambda = 0.827$ Å.

1.7 $\lambda = 1655$ Å.

1.8 $v_e = 1.24 \times 10^6$ m/s.

1.9 (a) $E_e = 5.7$ eV, (b) $E_{foton} = 19.3$ eV.

1.10 $\lambda = 8.7$ cm.

1.11 $\lambda = 1.5$ cm.

BÖLÜM 2

2.2 $v_g = \text{sabit} \times \sqrt{\lambda}$.

2.4 $v_f = \dfrac{c}{\sqrt{1-(v_0/v)^2}}$, $\quad v_g = \dfrac{c}{\sqrt{1+(v_0/v)^2}}$.

2.5 (a) $c_n = (-1)^n \dfrac{a}{n\pi}$,

(b) $c_0 = \dfrac{a}{2}$, tek n için: $c_n = -\dfrac{2a}{(n\pi)^2}$, çift n için: $c_n = 0$,

(c) $c_n = \dfrac{1-(-1)^n/e}{(n\pi)^2+1}$.

2.6 (a) $F(k) = \dfrac{2i}{k^2}(k\cos k - \sin k)$,

(b) $F(k) = \dfrac{2}{k^2}(k\sin k + \cos k - 1)$,

(c) $F(k) = \dfrac{2}{k^2}(1-\cos k)$.

2.9 $\Delta p_x = 5.3 \times 10^{-33}$ kg m/s, (b) $\Delta E = 4.6 \times 10^{-35}$ J, (c) $\Delta E/T = 1.5 \times 10^{-37}$, önemsiz.

2.11 (a) $\Delta E/E = 9 \times 10^{-17}$, (b) 9×10^{-2}

2.12 2.7×10^{-12} s.

BÖLÜM 3

3.1 (a) $A = 1/\sqrt{3a}$, (b) $\Delta x = \sqrt{2\pi^2/3 - 5}\,(\pi/a)$, (c) $\Delta p = \hbar\pi/\sqrt{3}a$.

3.2 $A = \sqrt{\pi/a}$, (b) $1/3$, (c) 0.

3.4 (b) $\langle p \rangle = 0$, $\langle E \rangle = \langle p^2 \rangle / 2m = \hbar^2/(8\pi m a^3)$.

BÖLÜM 4

4.1 $R = 0.03$, $T = 0.97$.

4.2 $a = 1$Å için $T = 0.05$.

4.8 $R = \left| \dfrac{3 + 5e^{4i\tilde{a}}}{15 + e^{4i\tilde{a}}} \right|^2$, $T = \left| \dfrac{24e^{i\tilde{a}}}{15 + e^{4i\tilde{a}}} \right|^2$ $(\tilde{a} = \sqrt{2mV_0}\, a/\hbar)$

(b) $a = \dfrac{(2n+1)\pi}{16} \dfrac{\hbar}{\sqrt{2mV_0}}$

4.9 Kare kuyunun sadece tek pariteli ($k\cot ka = -\alpha$) çözümleri alınır.

4.11 $\dfrac{\hbar^2\pi^2}{8m} < V_0 a^2 < \dfrac{\hbar^2\pi^2}{2m}$.

4.12 $V_0 = 21$ MeV.

4.13 (a) $\hbar\omega/2 \approx 0.08$ eV, (b) $\nu = 4 \times 10^{13}\ \mathrm{s}^{-1}$, $\lambda = 75000$ Å (kızılötesi).

4.14 $\langle xp + px \rangle = 0$.

4.15 (a) $n = 1, 3, 5$ sayılı durumlar ve enerjiler, (b) $\langle x \rangle = 2\sqrt{\hbar/\pi m\omega}$, $\langle p \rangle = 2\sqrt{\hbar\omega m/\pi}$

.

BÖLÜM 5

5.3 $A_1 = \sqrt{2}$, $A_2 = 2$, $A_3 = 2/\sqrt{3}$.

5.4 (a) $\psi = \sqrt{\frac{1}{10}}\, u_3 + \sqrt{\frac{9}{10}}\, u_8$, (b) $N(0 < x < a/2) = 556$.

5.5 $|c_4|^2 = 1/2$.

5.7 $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = 2$, $\psi_1 = \begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix}$, $\psi_2 = \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}$

5.8 $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = 5$, $\psi_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}$, $\psi_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$.

5.20 (a) $A = \sqrt{\dfrac{2}{9a}}$, (b) $\langle E \rangle = \dfrac{137}{9} \dfrac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$, (c) $P(0 < x < a/2) \approx 0.59$.

BÖLÜM 6

6.1 (a) Döteron: a_1 ve E_1 değişmez, (b) Li^{++} iyonu: $a_1 \to a_1/3$, $E_1 \to 9E_1$,
(c) Pozitronyum: $a_1 \to 2a_1$, $E_1 \to E_1/4$.

6.4 $A = 1/\sqrt{30}$,
(b) $P(l = 1) = 1/30$, $P(l = 3) = 4/30$, $P(l = 4) = 25/30$,
$P(m = +1) = 26/30$, $P(m = +2) = 4/30$,
(c) $\langle L^2 \rangle = 17.5\,\hbar^2$, $\langle L_z \rangle = 1.1\,\hbar$, (d) $\langle E \rangle = 1.75$ meV.

6.5 $|c_4|^2 = 1/2$.

6.6 $E = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\, n^2$.

6.7 $\theta = 0$.

6.8 (b) $\langle 11|L_x^2|11\rangle = \hbar^2/2$.

6.9 $P(a < r < 2a) \approx 0.05$.

6.10 $P_{2p}(r < r_p)/P_{2s}(r < r_p) = 5 \times 10^{-12}$ (p-yörüngeleri orijin civarında bulunmazlar).

6.11 $P_{21}(r < a) = 0.0037$, $P_{20}(r < a) = 0.0343$.

6.14 (a) $\Psi = A\, R_{32}(r) \left[\dfrac{1}{3}\, Y_2^2 + 8Y_2^{-2} + iY_2^1 + 2iY_2^{-1}\right]$,

(b) $A = 3/\sqrt{730}$, (c) $P(m = -2) = 576/730 = 0.79$,

(d) $\langle E\rangle = E_3$, $\langle L^2\rangle = 6\hbar^2$, $\langle L_z\rangle = -1.6\hbar$.

BÖLÜM 7

7.1 (a) $\Delta E_1 = \left(\dfrac{1}{3} - \dfrac{1}{2\pi^2}\right)\varepsilon$, (b) $\Delta E_1 = -\dfrac{8}{15\pi}\varepsilon$.

7.2 (a) $\Delta E_1 = \left(\dfrac{1}{2} + \dfrac{1}{\pi}\right) b$, $\Delta E_2 = \dfrac{b}{2}$. (b) $\Delta E_1 = \Delta E_2 = 0$.

7.3 $\Delta E_1 = \dfrac{8}{3\pi} V_0$, $\Delta E_2 = \dfrac{32}{15\pi} V_0$.

7.4 $E_1 = 0$.

7.5 $E_1^{(2)} = \dfrac{2ma}{\hbar^2\pi^2}\, \dfrac{32\varepsilon}{\pi^4} \sum_{i=2}^{\infty} \dfrac{i^2}{(i^2-1)^6} \approx 0.0018 \left(\dfrac{2ma\varepsilon}{\hbar^2\pi^2}\right)$.

7.6 $E_n = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega + \dfrac{1}{2}\, \dfrac{e^2\mathscr{E}}{m\omega^2}$.

7.7 $E_2 = 3\hbar\omega + W_2$ ve $W_2 = 0,\ \pm\hbar K/m\omega$.

7.10 $E_0 = -(32/3\pi) * (me^4/2\hbar^2) = -3.4 \times 13.6 = -46.2$ eV .

7.11 $E_n = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_0\, e^{-\lambda t/2}$.

7.15 (a) $P_3 = (4/9\pi)^2 \approx 0.02$ (b) $P_1 = (12/35\pi)^2 \approx 0.01$.

BÖLÜM 8

8.5 $4/14$.

8.6 (a) $A = \sqrt{5/2}$, (b) $P(+\tfrac{1}{2}) = 5/6$, $P(-\tfrac{1}{2}) = 1/6$,

(c) $P(L_z = 0) = 11/12$, $P(L_z = 1) = 1/12$.

8.10 .

$$|\tfrac{5}{2}\ \tfrac{3}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{4}{5}}\, |2\ 1\rangle|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{5}}\, |2\ 2\rangle|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\tfrac{3}{2}\ \tfrac{3}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{5}}\, |2\ 1\rangle|\tfrac{1}{2}\ +\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\tfrac{4}{5}}\, |2\ 2\rangle|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle$$

8.11 Denklem 8.32 ifadesinde $l = 0$ ve $j = \frac{1}{2}$ değerleri kullanılır.

8.13 $|\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle$.

8.14 $B \approx \dfrac{Z^4\alpha^2 R}{\mu_B n^3}$.

8.15 Denklem 8.35, 8.37 ve 8.39 ifadelerinde $l = 2$ kullanılarak hesap yapılır.

BÖLÜM 9

9.9 $P(+\frac{1}{2}) = 3/4$.

9.10 Alıştırma 9.5 deki yöntemi inceleyin.

BÖLÜM 10

10.1 (a) $\Psi_{S,A}(x_1,x_2) = [u_o(x_1)u_1(x_2) \pm u_1(x_2)u_o(x_2)]/\sqrt{2}$
(+simetrik, −antisimetrik)

(b) $E = 2\hbar\omega$, (c) $\langle(x_1 - x_2)^2\rangle = (1 \mp \frac{1}{4})\, m\omega/\hbar$ (−simetrik, +antisimetrik) .

10.3 (b) $4E_1$ ve $10E_1$.

10.4 (a) 0.028 (bozon), (b) 0.001 (fermiyon).

10.5

$$\Psi_{Li^*} = \frac{1}{\sqrt{3!}} \det \begin{vmatrix} u_{100}(1)\alpha(1) & u_{100}(2)\alpha(2) & u_{100}(3)\alpha(3) \\ u_{100}(1)\beta(1) & u_{100}(2)\beta(2) & u_{100}(3)\beta(3) \\ u_{210}(1)\alpha(1) & u_{210}(2)\alpha(2) & u_{210}(3)\alpha(3) \end{vmatrix} \quad \text{ve} \quad E = -275\,\text{eV}$$

10.6

$$\Psi_{Be^*} = \frac{1}{\sqrt{4!}} \det \begin{vmatrix} u_{100}(1)\alpha(1) & u_{100}(2)\alpha(2) & u_{100}(3)\alpha(3) & u_{100}(4)\alpha(4) \\ u_{100}(1)\beta(1) & u_{100}(2)\beta(2) & u_{100}(3)\beta(3) & u_{100}(4)\beta(4) \\ u_{200}(1)\alpha(1) & u_{200}(2)\alpha(2) & u_{200}(3)\alpha(3) & u_{200}(4)\alpha(4) \\ u_{210}(1)\beta(1) & u_{210}(2)\beta(2) & u_{210}(3)\beta(3) & u_{210}(4)\beta(4) \end{vmatrix}$$

ve $E = -544\,\text{eV}$.

10.8 $\Psi = A\left\{\phi_o(x_1)\phi_o(x_2)\phi_1(x_3) + \phi_o(x_1)\phi_1(x_2)\phi_o(x_3) + \phi_1(x_1)\phi_o(x_2)\phi_o(x_3)\right\}$.

BÖLÜM 11

11.1 $\dfrac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\dfrac{\pi mA}{2\hbar k \sin\theta/2}\right)^2$.

DİZİN

açısal momentum, 130, 191–218
  basamak operatörleri, 192
  matris temsili, 195–196
  toplam, 204
  toplamada üçgen kuralı, 204
  toplanması, 204–207
akı, 260
alfa bozunması, 73

bağımsız parçacıklar, 241–243
baz vektörü
  sürekli indis, 121
beklenen değer, 51–54
  zamanla gelişme, 116
belirsizlik ilkesi, 28, 36–38, 113–115
  enerji-zaman, 37, 117
Bessel
  diferansiyel denklemi, 140
  küresel fonksiyonları, 140–142
Bloch teoremi, 94
Bohr frekansı, 178
Bohr magnetonu, 173, 198
Bohr teorisi, 19–22
Bohr yarıçapı, 152
bozon, 241
Bragg formülü, 23
bütünleme ilkesi, 27

Clebsch-Gordan katsayıları, 206
Compton olayı, 17–19
Coulomb etkileşme enerjisi, 248

dalga fonksiyonu, 41
  fazı, 48
  norm, 46
  olasılık yorumu, 46
dalga paketi, 27–30
dalga-parçacık ikilemi, 16, 25
Davisson-Germer deneyi, 23
de Broglie dalgaboyu, 23, 24
de Broglie hipotezi, 22–23
değiş-tokuş enerjisi, 248
Dirac bra-ket notasyonu, 119–121
Dirac delta fonksiyonu, 61–62, 92
dönüşümler, 221–236
  birimsel, 226
  dönme, 221, 226–232
  öteleme, 221–225
  spin uzayında dönme, 229–232
  üretici operatör, 226
  yansıma, 221, 233–234
durum yoğunluğu, 182, 254–256
düzlem dalga, 59
  normlanması, 60

Ehrenfest teoremleri, 64
elektrik dipol etkileşmesi, 183
enerji bantları, 91–96

faz hızı, 29
Fermi'nin altın kuralı, 182
fermiyon, 241
fotoelektrik olay, 15–17
foton, 16
Fourier dönüşümü, 34
Fourier integrali, 33–35
Fourier serisi, 31–33
Fourier transformu, 55

Gauss dalga fonksiyonu, 56
geçiş kuralları, 182–184
geçiş olasılığı, 179
geçiş oranı, 182
geçme katsayısı, 68, 70
gözlenirlik ilkesi, 27
Gramm-Schmidt dikleştirme yöntemi, 108–110
Green fonksiyonu, 264–266

grup hızı, 30

hamiltonyen, 46
hareket sabiti, 116
harmonik salınıcı, 81–90
  iki boyutlu, 171–173
  üç boyutlu, 145
  momentum uzayında, 89
helyum atomu, 245–249
Hermite polinomları, 85–86
hermitik operatör, 106–108
  özdeğer ve özvektörleri, 107
hidrojen atomu, 145–158
  enerji düzeyleri, 151
  radyal dalga fonksiyonu, 148
  spinli, 209–211
hidrojen molekülü, 249–251

iki açısal momentumun toplamı, 204–207
iki elektron sistemi, 207
  spin dalga fonksiyonu, 207
  toplam dalga fonksiyonu, 208
iki-parçacık problemi
  bağıl koordinat, 147
  indirgenmesi, 146
  indirgenmiş kütle, 147
  kütle merkezi koordinatı, 147
ince yapı, 154, 213–215
ince yapı sabiti, 214
iş fonksiyonu, 16, 24
izdüşüm operatörü, 123–124

kapalılık bağıntısı, 102 90–91
karacisim ışıması, 12–15
kararlı durum, 58
karşılığı bulunma ilkesi,
katlı durumlar, 108, 136
klasik dönüm noktası, 66
komütatör, 43
kovalent bağ, 251
kuantum mekaniği
  1. postüla, 41
  2. postüla, 46
  3. postüla, 110
  4. postüla, 110
kutupsal koordinatlar, 127
küresel harmonikler, 134–137

Laguerre
  diferansiyel denklemi, 151
  polinomları, 151–152
Lande *g*-faktörü, 217
Legendre
  bağlı polinomları, 134
  diferansiyel denklemi, 132
  polinomları, 131–134

madde dalgası, 22
magnetik kuantum sayısı, 136
magnetik moment, 197
  spin, 212
  toplam, 212
  yörünge, 212
momentum uzayı, 54–57
  dalga fonksiyonu, 55
  harmonik salınıcı, 89

N-parçacık sistemi, 251–254
Neumann, küresel fonksiyonları, 140

olasılık, 46
  akım yoğunluğu, 50
  korunumu, 49–51
  yoğunluğu, 50
operatör, 42–44
  hermitik, 106–108
  hermitik eşlenik, 106
  izdüşüm, 123–124
  komütatör, 113–115
  laplasyen, 46
  lineer, 42
  matris temsili, 103–105
  ortak özvektörler, 118–119
  özdeğer ve özvektörler, 104–105
  parite, 122–123, 137

özdeş parçacıklar, 239–256

parite operatörü, 122–123
Pauli ilkesi, 242
Pauli spin matrisleri, 199–203
periyodik potansiyel, 91–96
pertürbasyon, 161–175
  1. derece, 163–164
  2. derece, 165–169

adyabatik, 184
ani, 185
harmonik, 179–182
katlı durumlar, 169–175
zamana bağımlı, 177–182
potansiyel
basamağı, 65–69
Dirac delta, 92
engeli, 69–74
harmonik salınıcı, 81–90
hidrojen atomu, 145
küresel kuyu, 142
küresel simetrik, 127
kare kuyu, 76
sonsuz kuyu, 74–76, 81
üç boyutlu sonsuz kuyu, 141–142

radyal Schrödinger denklemi, 138–140
Raleigh-Jeans yasası, 13
Ramsauer olayı, 77
Rutherford atom modeli, 19
Rutherford formülü, 271
Rydberg sabiti, 21

saçılma, 259–272
Born yöntemi, 267–272
Coulomb potansiyeli, 270
integral denklemi, 266
küresel potansiyel engeli, 269
Rutherford formülü, 271
saçılma genliği, 261–263
Schrödinger denklemi, 44–46
radyal, 129
zamandan bağımsız, 57–59
Schwarz eşitsizliği, 102
serbest parçacık, 59
üç boyutlu, 139–141
sıra değiştiren operatörler, 113–115
simetri, 221–236
ve katlılık, 235
ve korunum yasaları, 234–236
simetrileştirme ilkesi, 240
Slater determinantı, 252
spin, 197–203
spin-yörünge etkileşmesi, 213–215
spine bağımlı etkileşmeler, 211–218
spinör, 208
Stark olayı, 174–175
Stefan-Boltzmann sabiti, 12
Stern-Gerlach deneyi, 197
süperpozisyon ilkesi, 110–112

temel kuantum sayısı, 150
tesir kesiti, 260
diferansiyel, 260
tünel olayı, 69–74

varyasyon yöntemi, 175–177
vektör
baz vektörleri, 100–101
norm, 100
ortonormal baz, 101
skaler çarpım, 99–101
vektör uzayı, lineer, 99–101
viriyel teoremi, 159

Wien yasası, 13–14

yaklaşık Born yöntemi, 267–272
yaklaşık yöntemler, 161–187
yansıma katsayısı, 68, 70
Young deneyi, 25

Zeeman olayı, 215–218
normal, 173–174